# 科学技術計算ライブラリ
# ASL ユーザーズガイド
# ＜基本機能編 第２分冊＞

# はしがき

本書は, 科学技術計算ライブラリ ASL (Advanced Scientific Library) の概念, 機能, 利用方法などについて説明したものです.
当製品に対応する説明書は 7 分冊からなっており, 構成は次のとおりです. このうち本書は, 基本機能第 2 分冊について記述したものです.

基本機能 第 1 分冊

| 章 | タイトル | 内　容 |
|---|---|---|
| 1 | 使用の手引き | 本説明書の構成, 各項目の見方, および使用上の制限事項などの説明 |
| 2 | 格納モードの変換 | 配列データの格納モードの変換に関するサブルーチンのアルゴリズム, 使用方法および使用例の説明 |
| 3 | 基本行列演算 | 行列の基本演算に関するサブルーチンのアルゴリズム, 使用方法および使用例の説明 |
| 4 | 固有値・固有ベクトル | 実行列, 複素行列, 実対称行列, エルミート行列, 実対称バンド行列, 実対称 3 重対角行列, 実対称スパース行列, エルミートスパース行列の標準固有値問題および実行列, 実対称行列, エルミート行列, 実対称バンド行列の一般化固有値問題に関するサブルーチンのアルゴリズム, 使用方法および使用例の説明 |

基本機能 第 2 分冊

| 章 | タイトル | 内　容 |
|---|---|---|
| 1 | 使用の手引き | 本説明書の構成, 各項目の見方, および使用上の制限事項などの説明 |
| 2 | 連立 1 次方程式 (直接法) | 実行列, 複素行列, 正値対称行列, 実対称行列, エルミート行列, 実バンド行列, 正値対称バンド行列, 実 3 重対角行列, 実上三角行列, 実下三角行列の連立 1 次方程式に関するサブルーチンのアルゴリズム, 使用方法および使用例の説明 |

基本機能 第 3 分冊

| 章 | タイトル | 内　　　　　容 |
|---|---|---|
| 1 | 使用の手引き | 本説明書の構成, 各項目の見方, および使用上の制限事項などの説明 |
| 2 | フーリエ変換とその応用 | 1 次元, 2 次元および 3 次元の複素ならびに実フーリエ変換, 1 次元, 2 次元および 3 次元の畳み込み, 相関, パワー・スペクトル解析, ウェーブレット変換およびラプラス逆変換に関するサブルーチンのアルゴリズム, 使用方法および使用例の説明 |

基本機能 第 4 分冊

| 章 | タイトル | 内　　　　　容 |
|---|---|---|
| 1 | 使用の手引き | 本説明書の構成, 各項目の見方, および使用上の制限事項などの説明 |
| 2 | 微分方程式とその応用 | 〔常微分方程式初期値問題〕<br>連立高階, 陰的連立, 行列型, スティフ問題の連立高階, 連立 1 階, 高階常微分方程式<br>〔常微分方程式境界値問題〕<br>連立高階, 連立 1 階, 高階, 線形高階, 線形 2 階常微分方程式<br>〔積分方程式〕<br>第 2 種フレドホルム型, 第 1 種ボルテラ型積分方程式<br>〔偏微分方程式〕<br>2 次元および 3 次元の非同次ヘルムホルツ方程式<br>に関するサブルーチンのアルゴリズム, 使用方法および使用例の説明 |
| 3 | 数値微分 | 1 変数関数および多変数関数の数値微分に関するサブルーチンのアルゴリズム, 使用方法および使用例の説明 |
| 4 | 数値積分 | 有限区間, 半無限区間, 全無限区間, 2 次元有限区間, 多次元有限区間の数値積分に関するサブルーチンのアルゴリズム, 使用方法および使用例の説明 |
| 5 | 補間・近似 | 補間, 曲面補間, 最小二乗近似, 最小二乗曲面近似, チェビシェフ近似に関するサブルーチンのアルゴリズム, 使用方法および使用例の説明 |
| 6 | スプライン関数 | 3 次スプライン, 双 3 次スプラインおよび B–スプラインを用いた補間, 平滑化, 数値微分, 数値積分に関するサブルーチンのアルゴリズム, 使用方法および使用例の説明 |

基本機能 第 5 分冊

| 章 | タイトル | 内　　　容 |
|---|---|---|
| 1 | 使用の手引き | 本説明書の構成, 各項目の見方, および使用上の制限事項などの説明 |
| 2 | 特殊関数 | ベッセル関数, 変形ベッセル関数, 球ベッセル関数, ベッセル関数に関連した関数, ガンマ関数, ガンマ関数に関連した関数, 楕円関数, 初等関数の不定積分, ルジャンドル陪関数, 直交多項式, その他の特殊関数に関するサブルーチンのアルゴリズム, 使用方法および使用例の説明 |
| 3 | ソート・順位付け | ソート, 順位付けに関するサブルーチンの使用方法および使用例の説明 |
| 4 | 方程式の根 | 代数方程式, 非線形方程式, 連立非線形方程式の根に関するサブルーチンのアルゴリズム, 使用方法および使用例の説明 |
| 5 | 極値問題・最適化 | 制約なし関数の極小化, 制約なし関数二乗和の極小化, 制約付き 1 変数関数の極小化, 制約付き多変数関数の最小化, 最短路問題に関するサブルーチンのアルゴリズム, 使用方法および使用例の説明 |

基本機能 第 6 分冊

| 章 | タイトル | 内　　　容 |
|---|---|---|
| 1 | 使用の手引き | 本説明書の構成, 各項目の見方, および使用上の制限事項などの説明 |
| 2 | 乱数の検定 | 一様乱数の検定, 分布乱数の検定に関するサブルーチンの使用方法および使用例の説明 |
| 3 | 確率分布 | 連続分布, 離散分布に関するサブルーチンの使用方法および使用例の説明 |
| 4 | 基礎統計量 | 基礎統計量, 分散共分散, 相関係数に関するサブルーチンの使用方法および使用例の説明 |
| 5 | 推定と検定 | 区間推定, 検定に関するサブルーチンの使用方法および使用例の説明 |
| 6 | 分散分析・実験計画 | 1 元配置, 2 元配置, 多元配置, 乱塊法, グレコ・ラテン方格法, 累積法に関するサブルーチンの使用方法および使用例の説明 |
| 7 | ノンパラメトリック検定 | $\chi^2$ 分布による検定, その他分布による検定に関するサブルーチンの使用方法および使用例の説明 |
| 8 | 多変量解析 | 主成分分析, 因子分析, 正準相関分析, 判別分析, クラスタ分析に関するサブルーチンの使用方法および使用例の説明 |
| 9 | 時系列分析 | 自己相関・相互相関, 自己共分散・相互共分散, 平滑化・需要予測に関するサブルーチンの使用方法および使用例の説明 |
| 10 | 回帰分析 | 線形回帰, 非線形回帰に関するサブルーチンの使用方法および使用例の説明 |

共有メモリ並列機能

| 章 | タイトル | 内　　　　　容 |
|---|---|---|
| 1 | 使用の手引き | 本説明書の構成, 各項目の見方, および使用上の制限事項などの説明 |
| 2 | 基本行列演算 | 実行列および複素行列の積を求めるサブルーチンのアルゴリズム, 使用方法の説明 |
| 3 | 連立 1 次方程式 (直接法) | 実行列, 複素行列, 実対称行列, エルミート行列の連立 1 次方程式（直接法）に関するサブルーチンのアルゴリズム, 使用方法および使用例の説明 |
| 4 | 連立 1 次方程式 (反復法) | 実正値対称スパース行列, 実対称スパース行列, 実非対称スパース行列の連立 1 次方程式（反復法）に関するサブルーチンのアルゴリズム, 使用法および使用例の説明 |
| 5 | 固有値・固有ベクトル | 実対称行列およびエルミート行列の固有値問題に関するサブルーチンのアルゴリズム, 使用方法および使用例の説明 |
| 6 | フーリエ変換とその応用 | 1 次元, 2 次元および 3 次元の複素ならびに実フーリエ変換, 2 次元および 3 次元の畳み込み, 相関, パワー・スペクトル解析に関するサブルーチンのアルゴリズム, 使用方法および使用例の説明 |
| 7 | ソート | ソートに関するサブルーチンの使用方法および使用例の説明 |

2023 年　3 月　ASL 付属説明書　3.0.0-230301

**備考** (1) 本書に説明しているすべての機能は, プログラムプロダクトであり, ASL 1.1 に対応しています.

(2) 製品名などの固有名詞は, 各メーカーの登録商標または商標です.

(3) 本ライブラリは, 最新の数値計算技法を取り入れ, 開発されたものです. 従って, 最新の技術を維持する目的から, 改良または新しく追加されたサブルーチンが, 既存のサブルーチンの機能を包含し, かつ, これまで以上の高速性能が得られる場合には, 既存のサブルーチンを削除することもあります.

# 目 次

**第 1 章　使用の手引 1**
1.1　概　説 1
1.1.1　科学技術計算ライブラリ ASL の概要 1
1.1.2　ASL の特長 1
1.2　ライブラリの種類 2
1.3　マニュアルについて 3
1.3.1　『概　要』 3
1.3.2　サブルーチン説明文の構成 3
1.3.3　各項目の内容 3
1.4　サブルーチン名 7
1.5　注意事項 9

**第 2 章　連立 1 次方程式 (直接法) 11**
2.1　概 要 11
2.1.1　使用方法 12
2.1.2　使用上の注意 14
2.1.3　使用しているアルゴリズム 16
2.1.3.1　クラウト (Crout) 法 16
2.1.3.2　コレスキー (Cholesky) 法 17
2.1.3.3　修正コレスキー法 17
2.1.3.4　ガウス (Gauss) 法 18
2.1.3.5　Levinson の方法 19
2.1.3.6　Vandermonde 行列 20
2.1.3.7　サイクリック・リダクション法 22
2.1.3.8　逆行列の算出方法 27
2.1.3.9　行列式の値の算出方法 27
2.1.3.10　解の改良 28
2.1.3.11　近似解の精度推定 28
2.1.3.12　条件数 28
2.1.4　参考文献 31
2.2　実行列 (2 次元配列型) 32
2.2.1　DBGMSM, RBGMSM
多重右辺連立 1 次方程式 (実行列) 32
2.2.2　DBGMSL, RBGMSL
連立 1 次方程式 (実行列) 36
2.2.3　DBGMLU, RBGMLU
実行列の LU 分解 40

2.2.4 DBGMLC, RBGMLC
実行列の LU 分解と条件数 . . . . . . . . . . 42
2.2.5 DBGMLS, RBGMLS
連立 1 次方程式 (LU 分解後の実行列) . . . . . . . . . . 44
2.2.6 DBGMMS, RBGMMS
多重右辺連立 1 次方程式 (LU 分解後の実行列) . . . . . . . . . . 46
2.2.7 DBGMDI, RBGMDI
実行列の行列式と逆行列 . . . . . . . . . . 49
2.2.8 DBGMLX, RBGMLX
連立 1 次方程式の解の改良 (実行列) . . . . . . . . . . 51
2.3 複素行列 (2 次元配列型)(実数引数型) . . . . . . . . . . 54
2.3.1 ZBGMSM, CBGMSM
多重右辺連立 1 次方程式 (複素行列) . . . . . . . . . . 54
2.3.2 ZBGMSL, CBGMSL
連立 1 次方程式 (複素行列) . . . . . . . . . . 58
2.3.3 ZBGMLU, CBGMLU
複素行列の LU 分解 . . . . . . . . . . 62
2.3.4 ZBGMLC, CBGMLC
複素行列の LU 分解と条件数 . . . . . . . . . . 64
2.3.5 ZBGMLS, CBGMLS
連立 1 次方程式 (LU 分解後の複素行列) . . . . . . . . . . 66
2.3.6 ZBGMMS, CBGMMS
多重右辺連立 1 次方程式 (LU 分解後の複素行列) . . . . . . . . . . 68
2.3.7 ZBGMDI, CBGMDI
複素行列の行列式と逆行列 . . . . . . . . . . 71
2.3.8 ZBGMLX, CBGMLX
連立 1 次方程式の解の改良 (複素行列) . . . . . . . . . . 73
2.4 複素行列 (2 次元配列型) (複素引数型) . . . . . . . . . . 75
2.4.1 ZBGNSM, CBGNSM
多重右辺連立 1 次方程式 (複素行列) . . . . . . . . . . 75
2.4.2 ZBGNSL, CBGNSL
連立 1 次方程式 (複素行列) . . . . . . . . . . 78
2.4.3 ZBGNLU, CBGNLU
複素行列の LU 分解 . . . . . . . . . . 81
2.4.4 ZBGNLC, CBGNLC
複素行列の LU 分解と条件数 . . . . . . . . . . 83
2.4.5 ZBGNLS, CBGNLS
連立 1 次方程式 (LU 分解後の複素行列) . . . . . . . . . . 85
2.4.6 ZBGNMS, CBGNMS
多重右辺連立 1 次方程式 (LU 分解後の複素行列) . . . . . . . . . . 87
2.4.7 ZBGNDI, CBGNDI
複素行列の行列式と逆行列 . . . . . . . . . . 90
2.4.8 ZBGNLX, CBGNLX
連立 1 次方程式の解の改良 (複素行列) . . . . . . . . . . 92

2.5 正値対称行列 (2 次元配列型) (上三角型) . . . . . . . . . . 94
2.5.1 DBPDSL, RBPDSL
連立 1 次方程式 (正値対称行列) . . . . . . . . . . 94
2.5.2 DBPDUU, RBPDUU
正値対称行列の $LL^T$ 分解 . . . . . . . . . . 97
2.5.3 DBPDUC, RBPDUC
正値対称行列の $LL^T$ 分解と条件数 . . . . . . . . . . 98
2.5.4 DBPDLS, RBPDLS
連立 1 次方程式 ($LL^T$ 分解後の正値対称行列) . . . . . . . . . . 100
2.5.5 DBPDDI, RBPDDI
正値対称行列の行列式と逆行列 . . . . . . . . . . 102
2.5.6 DBPDLX, RBPDLX
連立 1 次方程式の解の改良 (正値対称行列) . . . . . . . . . . 104
2.6 実対称行列 (2 次元配列型) (上三角型) . . . . . . . . . . 106
2.6.1 DBSPSL, RBSPSL
連立 1 次方程式 (実対称行列) . . . . . . . . . . 106
2.6.2 DBSPUD, RBSPUD
実対称行列の $LDL^T$ 分解 . . . . . . . . . . 109
2.6.3 DBSPUC, RBSPUC
実対称行列の $LDL^T$ 分解と条件数 . . . . . . . . . . 111
2.6.4 DBSPLS, RBSPLS
連立 1 次方程式 ($LDL^T$ 分解後の実対称行列) . . . . . . . . . . 113
2.6.5 DBSPMS, RBSPMS
多重右辺連立 1 次方程式 ($LDL^T$ 分解後の実対称行列) . . . . . . . . . . 115
2.6.6 DBSPDI, RBSPDI
実対称行列の行列式と逆行列 . . . . . . . . . . 118
2.6.7 DBSPLX, RBSPLX
連立 1 次方程式の解の改良 (実対称行列) . . . . . . . . . . 120
2.7 実対称行列 (2 次元配列型) (上三角型) (軸選択なし) . . . . . . . . . . 122
2.7.1 DBSMSL, RBSMSL
連立 1 次方程式 (実対称行列) (軸選択なし) . . . . . . . . . . 122
2.7.2 DBSMUD, RBSMUD
実対称行列の $LDL^T$ 分解 (軸選択なし) . . . . . . . . . . 125
2.7.3 DBSMUC, RBSMUC
実対称行列の $LDL^T$ 分解と条件数 (軸選択なし) . . . . . . . . . . 127
2.7.4 DBSMLS, RBSMLS
連立 1 次方程式 ($LDL^T$ 分解後の実対称行列) (軸選択なし) . . . . . . . . . . 129
2.7.5 DBSMMS, RBSMMS
多重右辺連立 1 次方程式 ($LDL^T$ 分解後の実対称行列) (軸選択なし) . . . . . . . . . . 131
2.7.6 DBSMDI, RBSMDI
実対称行列の行列式と逆行列 (軸選択なし) . . . . . . . . . . 134
2.7.7 DBSMLX, RBSMLX
連立 1 次方程式の解の改良 (実対称行列) (軸選択なし) . . . . . . . . . . 136
2.8 実対称行列 (2 次元配列型) (下三角型)(軸選択なし) . . . . . . . . . . 138

2.8.1 DBSNSL, RBSNSL
連立 1 次方程式 (実対称行列)(軸選択なし) . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 138
2.8.2 DBSNUD, RBSNUD
実対称行列の $U^TDU$ 分解 (軸選択なし) . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 141
2.8.3 DBSNLS, RBSNLS
連立 1 次方程式 ($U^TDU$ 分解後の実対称行列) (軸選択なし) . . . . . . . . . . . . . . . 143
2.9 エルミート行列 (2 次元配列型) (上三角型) (実数引数型) . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 145
2.9.1 ZBHPSL, CBHPSL
連立 1 次方程式 (エルミート行列) . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 145
2.9.2 ZBHPUD, CBHPUD
エルミート行列の $LDL^*$ 分解 . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 149
2.9.3 ZBHPUC, CBHPUC
エルミート行列の $LDL^*$ 分解と条件数 . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 151
2.9.4 ZBHPLS, CBHPLS
連立 1 次方程式 ($LDL^*$ 分解後のエルミート行列) . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 153
2.9.5 ZBHPMS, CBHPMS
多重右辺連立 1 次方程式 ($LDL^*$ 分解後のエルミート行列) . . . . . . . . . . . . . . . 155
2.9.6 ZBHPDI, CBHPDI
エルミート行列の行列式と逆行列 . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 158
2.9.7 ZBHPLX, CBHPLX
連立 1 次方程式の解の改良 (エルミート行列) . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 160
2.10 エルミート行列 (2 次元配列型) (上三角型) (実数引数型) (軸選択なし) . . . . . . . . . . . . 162
2.10.1 ZBHRSL, CBHRSL
連立 1 次方程式 (エルミート行列) (軸選択なし) . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 162
2.10.2 ZBHRUD, CBHRUD
エルミート行列の $LDL^*$ 分解 (軸選択なし) . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 166
2.10.3 ZBHRUC, CBHRUC
エルミート行列の $LDL^*$ 分解と条件数 (軸選択なし) . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 168
2.10.4 ZBHRLS, CBHRLS
連立 1 次方程式 ($LDL^*$ 分解後のエルミート行列) (軸選択なし) . . . . . . . . . . . . . 170
2.10.5 ZBHRMS, CBHRMS
多重右辺連立 1 次方程式 ($LDL^*$ 分解後のエルミート行列) (軸選択なし) . . . . . . . 172
2.10.6 ZBHRDI, CBHRDI
エルミート行列の行列式と逆行列 (軸選択なし) . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 175
2.10.7 ZBHRLX, CBHRLX
連立 1 次方程式の解の改良 (エルミート行列) (軸選択なし) . . . . . . . . . . . . . . . . 177
2.11 エルミート行列 (2 次元配列型) (上三角型) (複素引数型) . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 179
2.11.1 ZBHFSL, CBHFSL
連立 1 次方程式 (エルミート行列) . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 179
2.11.2 ZBHFUD, CBHFUD
エルミート行列の $LDL^*$ 分解 . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 183
2.11.3 ZBHFUC, CBHFUC
エルミート行列の $LDL^*$ 分解と条件数 . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 185

2.11.4 ZBHFLS, CBHFLS
連立 1 次方程式 (LDL* 分解後のエルミート行列) . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 187
2.11.5 ZBHFMS, CBHFMS
多重右辺連立 1 次方程式 (LDL* 分解後のエルミート行列) . . . . . . . . . . . . . . . 189
2.11.6 ZBHFDI, CBHFDI
エルミート行列の行列式と逆行列 . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 192
2.11.7 ZBHFLX, CBHFLX
連立 1 次方程式の解の改良 (エルミート行列) . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 194
2.12 エルミート行列 (2 次元配列型) (上三角型) (複素引数型) (軸選択なし) . . . . . . . . . . . . 196
2.12.1 ZBHESL, CBHESL
連立 1 次方程式 (エルミート行列) (軸選択なし) . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 196
2.12.2 ZBHEUD, CBHEUD
エルミート行列の LDL* 分解 (軸選択なし) . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 199
2.12.3 ZBHEUC, CBHEUC
エルミート行列の LDL* 分解と条件数 (軸選択なし) . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 201
2.12.4 ZBHELS, CBHELS
連立 1 次方程式 (LDL* 分解後のエルミート行列) (軸選択なし) . . . . . . . . . . . . . 203
2.12.5 ZBHEMS, CBHEMS
多重右辺連立 1 次方程式 (LDL* 分解後のエルミート行列) (軸選択なし) . . . . . . . 205
2.12.6 ZBHEDI, CBHEDI
エルミート行列の行列式と逆行列 (軸選択なし) . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 208
2.12.7 ZBHELX, CBHELX
連立 1 次方程式の解の改良 (エルミート行列) (軸選択なし) . . . . . . . . . . . . . . . 210
2.13 実バンド行列 (バンド型) . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 212
2.13.1 DBBDSL, RBBDSL
連立 1 次方程式 (実バンド行列) . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 212
2.13.2 DBBDLU, RBBDLU
実バンド行列の LU 分解 . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 215
2.13.3 DBBDLC, RBBDLC
実バンド行列の LU 分解と条件数 . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 217
2.13.4 DBBDLS, RBBDLS
連立 1 次方程式 (LU 分解後の実バンド行列) . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 219
2.13.5 DBBDDI, RBBDDI
実バンド行列の行列式 . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 221
2.13.6 DBBDLX, RBBDLX
連立 1 次方程式の解の改良 (実バンド行列) . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 223
2.14 正値対称バンド行列 (対称バンド型) . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 226
2.14.1 DBBPSL, RBBPSL
連立 1 次方程式 (正値対称バンド行列) . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 226
2.14.2 DBBPUU, RBBPUU
正値対称バンド行列の $LL^T$ 分解 . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 229
2.14.3 DBBPUC, RBBPUC
正値対称バンド行列の $LL^T$ 分解と条件数 . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 230

2.14.4 DBBPLS, RBBPLS
連立 1 次方程式 ($LL^T$ 分解後の正値対称バンド行列) . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 232
2.14.5 DBBPDI, RBBPDI
正値対称バンド行列の行列式 . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 234
2.14.6 DBBPLX, RBBPLX
連立 1 次方程式の解の改良 (正値対称バンド行列) . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 236
2.15 実 3 重対角行列 (ベクトル型) . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 238
2.15.1 DBTDSL, RBTDSL
連立 1 次方程式 (実 3 重対角行列) . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 238
2.15.2 DBTPSL, RBTPSL
連立 1 次方程式 (正値対称 3 重対角行列) . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 240
2.16 実 3 重対角行列 (ベクトル型) . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 243
2.16.1 WBTDSL
連立 1 次方程式 (実 3 重対角行列) . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 243
2.16.2 WBTDLS
連立 1 次方程式 (リダクション操作後の実 3 重対角行列) . . . . . . . . . . . . . . . 246
2.17 定係数型実 3 重対角行列 (スカラ型) . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 249
2.17.1 WBTCSL
連立 1 次方程式 (定係数型実 3 重対角行列) . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 249
2.17.2 WBTCLS
連立 1 次方程式 (リダクション操作後の定係数型実 3 重対角行列) . . . . . . . . . . 252
2.18 Vandermonde 行列と Toeplitz 行列 . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 256
2.18.1 DBTOSL, RBTOSL
連立 1 次方程式 (Toeplitz 行列) . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 256
2.18.2 DBTSSL, RBTSSL
連立 1 次方程式 (対称 Toeplitz 行列) . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 260
2.18.3 DBVMSL, RBVMSL
連立 1 次方程式 (Vandermonde 行列) . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 263
2.19 実上三角行列 (2 次元配列型) . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 267
2.19.1 DBTUSL, RBTUSL
連立 1 次方程式 (実上三角行列) . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 267
2.19.2 DBTUCO, RBTUCO
実上三角行列の条件数 . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 269
2.19.3 DBTUDI, RBTUDI
実上三角行列の行列式と逆行列 . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 271
2.20 実下三角行列 (2 次元配列型) . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 273
2.20.1 DBTLSL, RBTLSL
連立 1 次方程式 (実下三角行列) . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 273
2.20.2 DBTLCO, RBTLCO
実下三角行列の条件数 . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 275
2.20.3 DBTLDI, RBTLDI
実下三角行列の行列式と逆行列 . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . 277

**付 録 A 用語説明** **279**

**付 録 B 配列データの取扱い方法** **287**
B.1 行列に対応した配列データ . . . . . . . . . . 287
B.2 データの格納方法 . . . . . . . . . . 289
B.2.1 実行列 (2 次元配列型) . . . . . . . . . . 289
B.2.2 複素行列 . . . . . . . . . . 290
B.2.3 実対称行列, 正値対称行列 . . . . . . . . . . 291
B.2.4 エルミート行列 . . . . . . . . . . 292
B.2.5 実バンド行列 (バンド型) . . . . . . . . . . 293
B.2.6 実対称バンド行列, 正値対称バンド行列 (対称バンド型) . . . . . . . . . . 294
B.2.7 実 3 重対角行列 (ベクトル型) . . . . . . . . . . 294
B.2.8 実対称 3 重対角行列, 正値対称 3 重対角行列 (ベクトル型) . . . . . . . . . . 295
B.2.9 定係数型実 3 重対角行列 (スカラ型) . . . . . . . . . . 295
B.2.10 三角行列 . . . . . . . . . . 295
B.2.11 不規則スパース行列 (対称行列専用) . . . . . . . . . . 296
B.2.12 不規則スパース行列 . . . . . . . . . . 297

**付 録 C ASL で使用している計算機依存定数** **299**
C.1 誤差判定のための単位 . . . . . . . . . . 299
C.2 浮動小数点データの値の最大値・最小値 . . . . . . . . . . 299

# 第 1 章　使用の手引

## 1.1　概　説

### 1.1.1　科学技術計算ライブラリ ASL の概要

科学技術計算ライブラリ ASL（Advanced Scientific Library）は, 数値解析プログラムの作成を強力に支援する数学ライブラリである．ASL では広範な数値解析分野で頻出するプログラムを提供しており, それらは VE(Vector Engine) 上で優れた実行速度と精度を実現するための高度な最適化が適用されている． ASL を用いることによって, 難解な数値計算アルゴリズムの詳細に煩わされることなく高度な数値解析プログラムを作成することができ, 数値解析プログラム開発の生産性を大幅に改善することができる．

ASL は, 基本機能, 共有メモリ並列機能で構成される．機能分類と本マニュアルの分冊との対応を表 1–1 に示す．

表 1–1　ASL　の機能分類

| 機能分類 | 分冊 |
|---|---|
| 基本機能 | 第 1〜6 分冊 |
| 共有メモリ並列機能 | 第 7 分冊 |

### 1.1.2　ASL　の特長

ASL の特長は, 次のとおりである．

(1) ハードウェア性能を十分発揮できるように設計しており, コンパイラの最適化機能を用いて作成した．

(2) 行列を扱うサブルーチンでは, 行列の種類 (対称行列, エルミート行列など) に応じて最適に処理を行えるように, 専用のサブルーチンをそれぞれ提供している．一般に, 専用のサブルーチンを用いて処理を行った方が, 処理性能を向上したり, 必要なメモリ容量を節約したりすることができる．

(3) 処理手順に従ってモジュール化を行い, コンポーネントサブルーチンごとの信頼性向上に努めるとともに, システム全体の効率化, 信頼性向上を図った．

(4) サブルーチンを利用した後の エラーインディケータの番号が体系的に決めてあるので, エラー情報を把握しやすい．

## 1.2　ライブラリの種類

ASL には, 32 ビット整数型ライブラリと 64 ビット整数型ライブラリがある. 32 ビット整数型ライブラリに含まれるサブルーチンの整数型の引数は, 32 ビット (4 バイト) 整数型である. 一方, 64 ビット整数型ライブラリに含まれるサブルーチンの整数型の引数は, 64 ビット (8 バイト) 整数型である. また, サブルーチンの実数型の引数によってサブルーチン名が異なる. サブルーチン名については, 1.4 を参照のこと.

表 1−2　ASL で提供しているライブラリの種類

| 変数の大きさ (バイト) | | 引数の型宣言文 | 通称 | ライブラリの種類 |
|---|---|---|---|---|
| 整数型 | 実数型 | | | |
| 4 | 8 | INTEGER(4)<br>REAL(8) | 32 ビット整数型倍精度<br>サブルーチン | 32 ビット整数型ライブラリ<br>(リンクオプション：-lasl_sequential) |
| 4 | 4 | INTEGER(4)<br>REAL(4) | 32 ビット整数型単精度<br>サブルーチン | |
| 8 | 8 | INTEGER(8)<br>REAL(8) | 64 ビット整数型倍精度<br>サブルーチン | 64 ビット整数型ライブラリ<br>(リンクオプション：-lasl_sequential_i64) |
| 8 | 4 | INTEGER(8)<br>REAL(4) | 64 ビット整数型単精度<br>サブルーチン | |

**（注 1）**機能によっては, 4 種類全てをサポートしているとは限らない. その場合, 個別の説明の注意事項の欄に記述するので注意されたい.

**（注 2）**INTEGER(4) および REAL(4) で型宣言する場合, “(4)” は省略可.

## 1.3 マニュアルについて

ここでは本マニュアルの第 2 章以降の構成について述べる.
第 2 章以降は ASL で用いられるサブルーチンとその機能, 使用方法の説明を行う.

### 1.3.1 『概　要』

各章の第 1 節では, 概要として各サブルーチンの効果的な使用法, 採用した手法およびそのアルゴリズム, 注意事項などについて述べてある.

### 1.3.2 サブルーチン説明文の構成

各章の第 2 節では, サブルーチンごとに以下の順で説明している.

(1) 機能

(2) 使用法

(3) 引数

(4) 制限条件

(5) エラーインディケータ

(6) 注意事項

(7) 使用例

各項目は次に述べる原則に従って記述されている.

### 1.3.3 各項目の内容

(1) **機 能**
この項目では, サブルーチンの目的とする機能について簡単に述べてある.

(2) **使用法**
この項目では, サブルーチン名とその引数の順序について記述してある.
引数の並べ方は, 原則として次のように決められている.

**CALL　サブルーチン名 (入力引数, 入出力引数, 出力引数, ISW, ワーク, IERR)**

ここで, ISW は処理の手順を指定するための入力引数であり, IERR は エラーインディケータである. ただし, 入力引数と入出力引数の順序が逆の場合もある. さらに次の規則にしたがっている.

- 配列は重要度に応じてできるだけ左方によせる.
- 配列名に続けて配列の大きさをそえる. 同じ大きさをもつ配列が複数個あるときは, その最初の配列名に続けてその大きさを引数として与え, 2 番目以降の配列からは, その大きさは引数として与えない.

(3) **引　数**

(2) 項で記述された引数について, 順番に説明されている. その形式は以下のように統一されている.

| **引数** | **型** | **大きさ** | **入出力** | **内 容** |
|---|---|---|---|---|
| (a) | (b) | (c) | (d) | (e) |

(a) 引数

引数が記載されている.

(b) 型

引数のデータの型を示す. 次の略記号のいずれかに示されている.

**I** ：整数型

**D** ：倍精度実数型

**R** ：単精度実数型

**Z** ：倍精度複素数型

**C** ：単精度複素数型

整数型の引数には 64 ビット整数型と 32 ビット整数型とがある. サブルーチンの整数型引数が 64 ビット整数型であるのか 32 ビット整数型であるのかは, そのサブルーチンが 64 ビット整数型であるか 32 ビット整数型であるか, つまりライブラリの種類によって決められる (1.2 参照). ユーザプログラムにおいて引数の型を宣言する際は, 32 ビット整数型の引数は`INTEGER(4)`, 64 ビット整数型の引数は`INTEGER(8)` を用いて宣言する必要がある.

(c) 大きさ

指定された引数の必要な大きさを示す. 2 以上を指定した場合には, このサブルーチンを利用したプログラム側で, その必要な領域を確保しなければならない.

1　：変数であることを示す.

N　：要素が N 個の 1 次元配列であることを示す. この配列が指定された直後にその大きさを示す引数 N が定義される. ただし大きさ N が以前に定義された配列の大きさを規定している場合には省略される. このほかに数値のみにて指定する場合や, $3 \times \mathrm{N}$ や $\mathrm{N} + \mathrm{M}$ のように, 積または和の形で表記する場合もある.

M, N ：M 行 N 列の 2 次元の配列であることを示す. この配列が指定される前にこの M と N が定義されていない場合は, この配列の直後にその大きさを示す引数 M または N が定義される.

(d) 入出力

引数の内容説明が入力時であるか出力時であるかを示す.

i. 「入力」とだけある場合：

このサブルーチンを利用したプログラムに制御がもどったときに, 引数の入力時の情報は保存されている. 入力時の情報は特に断らない限り, 利用者が与えなければならない.

ii. 「出力」とだけある場合：

引数には, サブルーチン内で計算された結果が出力される. 入力時には何も入れなくてよい.

iii. 「入力」と「出力」の両方に説明がある場合：

サブルーチンに制御がわたる前とサブルーチンから制御がもどった後で, この引数の内容に変化がある場合である. 入力時の情報は特に断らない限り, 利用者が与えなければならない.

iv. 「ワーク」とある場合：

サブルーチン内で演算を行うときに利用する領域であること示す. サブルーチンを利用するプログラム側で, 指定された大きさの作業領域を確保しなければならない. なお, 次の計算に流用するために, 作業領域の内容を保存しておく必要がある場合がある.

(e) 内 容

入力時あるいは出力時に, 引数が保持している情報について説明される.

- 「引 数」の説明の例を次に示す.

**例** 実行列の LU 分解と条件数を求めるサブルーチン (DBGMLC, RBGMLC) の使用法は以下のとおりである.

倍精度サブルーチン:

CALL DBGMLC (A, LNA, N, IPVT, COND, W1, IERR)

単精度サブルーチン:

CALL RBGMLC (A, LNA, N, IPVT, COND, W1, IERR)

この場合の引数の説明は次のようになる.

表 1–3 引数の例

D:倍精度実数型 Z:倍精度複素数型 I: $\left\{\begin{matrix}\text{32 ビット整数版では INTEGER(4)}\\\text{64 ビット整数版では INTEGER(8)}\end{matrix}\right\}$
R:単精度実数型 C:単精度複素数型

| 項番 | 引数名 | 型 | 大きさ | 入出力 | 内 容 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | A | $\left\{\begin{matrix}\text{D}\\\text{R}\end{matrix}\right\}$注 | LNA, N | 入 力 | 実行列 $A$(2 次元配列型) |
| | | | | 出 力 | $A = LU$ と分解した時の単位上三角行列 $U$ および下三角行列 $L$ |
| 2 | LNA | I | 1 | 入 力 | 配列 A の整合寸法 |
| 3 | N | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の次数 $n$ |
| 4 | IPVT | I | N | 出 力 | ピボッティング情報<br>IPVT($i$): $i$ 段目の処理において行 $i$ と交換した行の番号 |
| 5 | COND | $\left\{\begin{matrix}\text{D}\\\text{R}\end{matrix}\right\}$ | 1 | 出 力 | 条件の逆数 |
| 6 | W1 | $\left\{\begin{matrix}\text{D}\\\text{R}\end{matrix}\right\}$ | N | ワーク | 作業領域 |
| 7 | IERR | I | 1 | 出 力 | エラーインディケータ |

このサブルーチンを利用するには, まず, 引数として使用する配列 A, IPVT および W1 を, 呼び出し元の利用者プログラム側でアロケートする必要がある. それらはそれぞれ, $\left\{\begin{matrix}\text{倍精度}\\\text{単精度}\end{matrix}\right\}$注 実数型で大きさ (LNA, N), 整数型で大きさ N, $\left\{\begin{matrix}\text{倍精度}\\\text{単精度}\end{matrix}\right\}$実数型で大きさ N の配列である.
また, 64 ビット整数版を利用する場合には, 整数型引数 (LNA,N,IPVT,IERR) はすべて`INTEGER`ではなく`INTEGER(8)`を用いて宣言する必要がある.

**注** DBGMLC のときには倍精度実数型 (略記号 D), RBGMLC のときには実数型 (略記号 R) で宣言することを意味する. 以下, 本文中で特に断らない限り中括弧 {} 等の使用法は, 同様の扱いとする.

このサブルーチンを使用するときには, A, LNA および N にデータを格納しておかなければならない. サブルーチン内では, 与えられた行列の LU 分解と条件数の算出が行われ, 結果が配列 A と変数 COND に格納される. また, 後続サブルーチンで利用するため, ピボッティング情報が IPVT に格納される.

IERR は, 入力データや処理途中の異常を利用者に知らせるための引数であり, 正常の場合は 0 にセットされる.

なお, W1 はサブルーチン内でのみ使用する作業領域であるので, 入力時および出力時の内容は特に意味をもたない.

### (4) **制限条件**

サブルーチンの引数の制限範囲を明確にしてある.

### (5) **エラーインディケータ**

各サブルーチンには, エラーインディケータが出力引数として設けられている. この エラーインディケータは, IERR という変数名に統一されており, 引数表の最後におかれている. 各サブルーチンはサブルーチン内でエラー検出を行い, その結果を IERR に設定する. IERR の値の意味は, 次の 5 段階に分かれている.

表 1–4　エラーインディケータの出力値区分

| レベル | IERR の値 | 意　　　味 | 処　理　内　容 |
|---|---|---|---|
| 正　常 | 0 | 正常終了した. | 結果は保証される. |
| 警　告 | 1000～2999 | ある条件のもとで一応の処理が終了した. | 条件付きで結果は保証される. |
| 異　常 | 3000～3499 | 引数が制限条件に違反したために処理が打ち切られた. | 結果は保証されない. |
| | 3500～3999 | 得られた結果がある検定条件を満足しなかった. | 得られた結果を返す (結果は保証されない). |
| | 4000 以上 | 処理の途中で致命的なエラーが発見された. 通常は処理を打ち切る. | 結果は保証されない. |

### (6) **注意事項**

サブルーチンを使用するときの注意点およびあいまいな点を明確にしてある.

### (7) **使用例**

サブルーチンの使い方の一例を載せてある. なお複数のサブルーチンを組み合わせて一つの例としてある場合もあるので注意されたい. 出力結果は, 32 ビット整数版での結果であり, コンパイラや組み込み関数の変更などにより丸め誤差の範囲で異なる場合がある.

本説明書に記載されている使用例のプログラムはソースコードの形で「ASL ユーザーズガイド」に収録されている. 入力データも (もし存在する場合は)「ASL ユーザーズガイド」に収録されている. コンパイラを用いて使用例のソースコードから実行形式ファイルを作成する場合には, ライブラリ本体とリンクする必要がある.

## 1.4　サブルーチン名

ASL の基本機能のサブルーチン名は, 6 桁のアルファニューメリック記号の集まりである.
また, サブルーチン名の各記号にはそれぞれ意味を持ち, 図 1–1 で表される. 利用時においては, 計算用途に合わせてサブルーチン名を指定する必要がある.

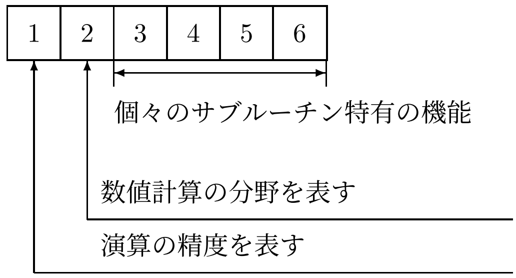



図 1–1　サブルーチン名の構成要素

**図** 1–1 **の "1" ：** 演算の精度を表す. 基本機能編で使用される文字は, 次の 8 種類である.

| | |
|---|---|
| D, W | 倍精度実数型演算 |
| R，V | 単精度実数型演算 |
| Z，J | 倍精度複素数型演算 |
| C，I | 単精度複素数型演算 |

ただし, 上記の複素数型とは必ずしも引数の型が複素数型であることを意味しない.

**図** 1–1 **の "2" ：** 計算の分野を表す. 現在, ASL では次の文字が使用されている.

| 文字 | 計算の分野 | 分冊 |
|---|---|---|
| A | 格納モードの変換 | 1 |
| | 基本行列演算 | 1, 7 |
| B | 連立 1 次方程式 (直接法) | 2, 7 |
| C | 固有値・固有ベクトル | 1, 7 |
| F | フーリエ変換とその応用 | 3, 7 |
| | 時系列分析 | 6 |
| G | スプライン関数 | 4 |
| H | 数値積分 | 4 |
| I | 特殊関数 | 5 |
| J | 乱数の検定 | 6 |
| K | 常微分方程式初期値問題 | 4 |
| L | 方程式の根 | 5 |
| M | 極値問題・最適化 | 5 |
| N | 近似・回帰分析 | 4, 6 |
| O | 常微分方程式境界値問題, 積分方程式, 偏微分方程式 | 4 |
| P | 補間 | 4 |
| Q | 数値微分 | 4 |

| 文字 | 計算の分野 | 分冊 |
|---|---|---|
| S | ソート・順位付け | 5, 7 |
| X | 基本行列演算 | 1 |
| | 連立 1 次方程式 (反復法) | 7 |
| 1 | 確率分布 | 6 |
| 2 | 標本統計 | 6 |
| 3 | 推定と検定 | 6 |
| 4 | 分散分析・実験計画 | 6 |
| 5 | ノンパラメトリック検定 | 6 |
| 6 | 多変量解析 | 6 |

**図** 1–1 **の "3" ～ "6"：** これらの文字で, 個々のサブルーチンに特有の機能を表す.

## 1.5 注意事項

(1) 単精度版ではなく, 倍精度版を標準として利用する方がよい. 精度が高いことに加え, 倍精度版の方が単精度版に比べて安定的に解が求まる場合 (特に固有値・固有ベクトル) が多い.

(2) 演算例外の抑止はメインプログラム側で行う必要がある. ASL のサブルーチンでは, コンパイラの演算例外の抑止に関して, ユーザのメインプログラムのコンパイルパラメータの指示に従うように設定してある.

(3) 扱う演算桁数を越える精度を期待することはできない. たとえば倍精度演算の (仮数部の) 演算桁数は 10 進 15 桁程度であるが, ここで数学的に 1 となるような値を計算した場合, $10^{-15}$ 程度の誤差は必ず発生する. これを抑制する方法として, 任意桁数演算のような多倍長演算のエミュレートが考えられるが, この場合, たとえば円周率のような定数や関数近似の定数なども都度計算する必要が生じるので, 通常の演算と比較して計算効率は悪くなる.

(4) 数学的に解が存在しないような問題の解を得ることはできない. たとえば, 数学的に特異な (または特異に近い) 行列を係数に持つ連立 1 次方程式の解を精度良く求めることは原理的にできない. なお, 数値計算上は, 数学的に特異な行列と特異に近い行列とを厳密に区別することはできない. もちろん, たとえば, 条件数の計算値が設定した基準値以上であれば特異とみなすというようなことはいつでも可能である.

(5) 浮動小数点例外 (オーバフローなど) をおこすようなデータを与えた場合, 正常な計算結果を期待することはできない. ただし, 反復計算で残差の加算等を行った場合に発生する浮動小数点アンダフローなどはこの限りではない.

(6) 数値計算で扱う問題 (特に反復法を計算手法とする問題) では, 与えるデータによっては解が精度良く求められない場合や全く求まらない場合がある. このような場合は, 問題自体を見直して, 解が求まるような問題に変更するなどの処置を講じる必要がある. たとえば, スパース行列を係数とする連立 1 次方程式を解く場合に, 専用のサブルーチンで解が得られないときでも, 密行列用のサブルーチンを用いることで解が得られる場合がある.

(7) 解が複数ある問題を解く場合, 実行するマシンや OS, 用いるコンパイラ等で実行結果が見掛け上異なる場合がある. たとえば, 固有値問題を解いた場合に得られる固有ベクトルがこれに相当する.

(8) “[非推奨]” と表示のあるサブルーチンは, 今後廃止予定の機能である. より高速な実装が **ASL 統合インタフェース**で提供されているので, そちらを利用されたい.

# 第 2 章　連立 1 次方程式 (直接法)

## 2.1　概 要

本章では, 連立 1 次方程式の解および行列の行列式の値と逆行列を求めるサブルーチンについて説明する.
本ライブラリでは, 個々の行列の性質および格納形式ごとに以下の機能をもつサブルーチンが用意されている.

(1) 三角分解を行い, 連立 1 次方程式を解く.

(2) 係数行列の三角分解を行う.

(3) 係数行列の三角分解を行い, 条件数を求める.

(4) 三角分解後の連立 1 次方程式の解を求める.

(5) 行列式の値, 逆行列を求める.

利用者は, (1)∼ (5) の各サブルーチンを目的とする処理に合わせて自由に組み合わせることができる. これにより, 演算回数の無駄などのない効率のよい処理を行うことができる.
また, 行列の三角分解はその行列の性質に最も適した手法で行われているため, おのおのの行列ごとに使用手法が異なっている.
また, 実 3 重対角行列では, 係数行列の性質により, 実 3 重対角行列 (ベクトル型) と定係数型実 3 重対角行列 (スカラ型) の 2 種類に分類され, それぞれ以下の機能をもつサブルーチンが用意されている.

(1) 連立 1 次方程式を解く (リダクション操作と求解またはガウス法を用いた求解を行う).

(2) 解を求める (リダクション操作後の求解のみを行う).

利用者は, (1), (2) のサブルーチンを目的とする処理に合わせて自由に組み合わせることができる. これにより, 演算回数の無駄などのない効率のよい処理を行うことができる.

### 2.1.1 使用方法

実行列 (2 次元配列型) の場合を例に挙げて説明する.

(1) 連立 1 次方程式

(1) $\begin{Bmatrix} \text{DBGMSL} \\ \text{RBGMSL} \end{Bmatrix}$を利用する方法

$$\text{CALL} \begin{Bmatrix} \text{DBGMSL} \\ \text{RBGMSL} \end{Bmatrix} (A, \cdots, \boldsymbol{b}, \cdots)$$

係数行列 $A$ の三角分解を行い, $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ の解を求める.

(2) $\begin{Bmatrix} \text{DBGMLU} \\ \text{RBGMLU} \end{Bmatrix}$と$\begin{Bmatrix} \text{DBGMLS} \\ \text{RBGMLS} \end{Bmatrix}$を利用する方法

$$\text{CALL} \begin{Bmatrix} \text{DBGMLU} \\ \text{RBGMLU} \end{Bmatrix} (A, \cdots)$$

$$\text{CALL} \begin{Bmatrix} \text{DBGMLS} \\ \text{RBGMLS} \end{Bmatrix} (A, \cdots, \boldsymbol{b}, \cdots)$$

$\begin{Bmatrix} \text{DBGMLU} \\ \text{RBGMLU} \end{Bmatrix}$で係数行列 $A$ の三角分解を行い, $\begin{Bmatrix} \text{DBGMLS} \\ \text{RBGMLS} \end{Bmatrix}$で $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ の解を求める.

(3) 条件数も求める方法

$$\text{CALL} \begin{Bmatrix} \text{DBGMLC} \\ \text{RBGMLC} \end{Bmatrix} (A, \cdots, \text{COND}, \cdots)$$

$$\text{CALL} \begin{Bmatrix} \text{DBGMLS} \\ \text{RBGMLS} \end{Bmatrix} (A, \cdots, \boldsymbol{b}, \cdots)$$

$\begin{Bmatrix} \text{DBGMLC} \\ \text{RBGMLC} \end{Bmatrix}$で係数行列 $A$ の三角分解と条件数の算出を行い, $\begin{Bmatrix} \text{DBGMLS} \\ \text{RBGMLS} \end{Bmatrix}$で $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ の解を求める.

(2) 行列式, 逆行列

$$\text{CALL} \begin{Bmatrix} \text{DBGMLU} \\ \text{RBGMLU} \end{Bmatrix} (A, \cdots)$$

$$\text{CALL} \begin{Bmatrix} \text{DBGMDI} \\ \text{RBGMDI} \end{Bmatrix} (A, \cdots, \text{DET}, \cdots)$$

$\begin{Bmatrix} \text{DBGMLU} \\ \text{RBGMLU} \end{Bmatrix}$で行列 $A$ の三角分解を行い, $\begin{Bmatrix} \text{DBGMDI} \\ \text{RBGMDI} \end{Bmatrix}$で行列式と逆行列を求める.

(3) 解の改良

(1) $\begin{Bmatrix} \text{DBGMSL} \\ \text{RBGMSL} \end{Bmatrix}$を利用する方法

$A_2 \leftarrow A$

$\boldsymbol{b_2} \leftarrow \boldsymbol{b}$

$$\text{CALL} \begin{Bmatrix} \text{DBGMSL} \\ \text{RBGMSL} \end{Bmatrix} (A_2, \cdots, \boldsymbol{b}_2, \cdots)$$

$$\text{CALL} \begin{Bmatrix} \text{DBGMLX} \\ \text{RBGMLX} \end{Bmatrix} (A, \cdots, A_2, \cdots, \boldsymbol{b}, \cdots, \boldsymbol{b}_2, \cdots)$$

$\begin{Bmatrix} \text{DBGMSL} \\ \text{RBGMSL} \end{Bmatrix}$で求められた解を改良する.

(2) $\begin{Bmatrix}\text{DBGMLU}\\ \text{RBGMLU}\end{Bmatrix}$と$\begin{Bmatrix}\text{DBGMLS}\\ \text{RBGMLS}\end{Bmatrix}$を利用する方法

$A_2 \leftarrow A$

$\boldsymbol{b_2} \leftarrow \boldsymbol{b}$

CALL $\begin{Bmatrix}\text{DBGMLU}\\ \text{RBGMLU}\end{Bmatrix}$ $(A_2, \cdots)$

CALL $\begin{Bmatrix}\text{DBGMLS}\\ \text{RBGMLS}\end{Bmatrix}$ $(A_2, \cdots, \boldsymbol{b}_2, \cdots)$

CALL $\begin{Bmatrix}\text{DBGMLX}\\ \text{RBGMLX}\end{Bmatrix}$ $(A, \cdots, A_2, \cdots, \boldsymbol{b}, \cdots, \boldsymbol{b}_2, \cdots)$

$\begin{Bmatrix}\text{DBGMLU}\\ \text{RBGMLU}\end{Bmatrix}$で $A$ を三角分解し, $\begin{Bmatrix}\text{DBGMLS}\\ \text{RBGMLS}\end{Bmatrix}$でその解を求め, $\begin{Bmatrix}\text{DBGMLX}\\ \text{RBGMLX}\end{Bmatrix}$で解を改良する.

### 2.1.2 使用上の注意

(1) 連立 1 次方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ を解く場合, 数式上は $\boldsymbol{x} = A^{-1}\boldsymbol{b}$ であるが, 逆行列 $A^{-1}$ を求めて, それを定数ベクトルに掛けるのは得策ではない. たとえば, 実行列 (2 次元配列型) の場合, 係数行列の三角分解を行ってから解を求める場合と比べると, 変数が $n$ 個の場合では前者が約 $n^3$ 回, 後者が約 $n^3/3$ 回の乗算を必要とし, 明らかに後者の方が有利である. したがって, 逆行列 $A^{-1}$ はそれ自体を必要とするときにのみ求めるべきである.

(2) 定数ベクトルのみが異なる複数の連立 1 次方程式を解く場合など, 同一の行列に対して何度も演算を行う場合には, 最初に一度だけ三角分解を行い, 以降はその結果を繰り返し利用すると効率がよい.
**例**

$$\begin{aligned} A\boldsymbol{x}_1 &= \boldsymbol{b}_1 \\ A\boldsymbol{x}_2 &= \boldsymbol{b}_2 \end{aligned}$$

を解く場合,

$$\text{CALL} \left\{ \begin{matrix} \text{DBGMSL} \\ \text{RBGMSL} \end{matrix} \right\} (A, \cdots, \boldsymbol{b}_1, \cdots)$$
$$\text{CALL} \left\{ \begin{matrix} \text{DBGMLS} \\ \text{RBGMLS} \end{matrix} \right\} (A, \cdots, \boldsymbol{b}_2, \cdots)$$

とするか, または

$$\text{CALL} \left\{ \begin{matrix} \text{DBGMLU} \\ \text{RBGMLU} \end{matrix} \right\} (A, \cdots)$$
$$\text{CALL} \left\{ \begin{matrix} \text{DBGMLS} \\ \text{RBGMLS} \end{matrix} \right\} (A, \cdots, \boldsymbol{b}_1, \cdots)$$
$$\text{CALL} \left\{ \begin{matrix} \text{DBGMLS} \\ \text{RBGMLS} \end{matrix} \right\} (A, \cdots, \boldsymbol{b}_2, \cdots)$$

のようにするとよい. 係数行列 $A$ は$\left\{ \begin{matrix} \text{DBGMSL} \\ \text{RBGMSL} \end{matrix} \right\}$または$\left\{ \begin{matrix} \text{DBGMLU} \\ \text{RBGMLU} \end{matrix} \right\}$によって三角分解され, 以降は内容を変えることなく参照のみが行われる.

(3) 三角分解を行うサブルーチンとしては, 条件数を求めるものと求めないものの 2 通りが用意されているが, 前者の方が条件数を求める演算の分だけ演算回数が多くなっている. $n$ 次元の行列の場合, 前者は後者より約 $n^2$ 回乗算が多い. 従って, 条件数を特に必要としない限り, 条件数を求めずに三角分解のみを行った方が実行時間は節約できる.

(4) 複素引数型と記載されているサブルーチンの入力データおよび出力データの配列の型は複素数型であるが, その他のサブルーチンではすべて実数型である.

(5) スパース行列を係数行列に持つ連立 1 次方程式を解く際, 反復法を用いることもできるが, 以下の点を考慮して使い分けるとよい.

- スパース行列を係数にもつ連立 1 次方程式を解く場合, 直接法では係数行列の性質に依存せず, 有限回の演算により解が求まるのに対して, 反復法では, 係数行列の性質により速く解が収束する場合や逆に解が求まらない場合がある.
- 係数行列が正値対称である場合や対角優位である場合等, 一般に反復法のサブルーチンを用いた方が速く解が求まる.
- 一方反復法で解が求まらない場合でも, 直接法を用いれば解が求まることがある.
- なお, 係数行列が特異に近い場合には, どちらの方法を用いても解を精度良く求めることはできない.

- 三角分解を行うサブルーチンとしては, 条件数を求めるものと求めないものの 2 通りが用意されるが, 前者の方が条件数を求める演算の分だけ演算回数が多くなってくる.

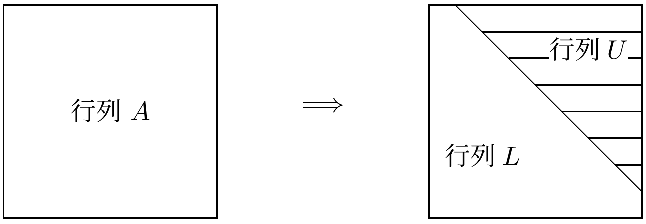
  $n$ 次元の行列の場合, 前者は後者より約 $n^2$ 回乗算が多い. 従って, 条件数を特に必要としない限り, 条件数を求めずに三角分解のみを行った方が実行時間は節約できる.

### 2.1.3　使用しているアルゴリズム

#### 2.1.3.1　クラウト (Crout) 法

係数行列 $A$ を下三角行列 $L$ と単位上三角行列 $U$ の積に分解する.

$A = LU$




本ライブラリでは, 部分軸選択を行うため, 実際は

$PA = LU(P$ は行交換用置換行列)

となる.

$$A = (a_{ij}), L = (l_{ij}), U = (u_{ij}) \quad (i, j = 1, 2, \cdots, N)$$

とすると, アルゴリズムは以下のとおりである.

$$l_{i1} \leftarrow a_{i1} \quad (i = 1, 2, \cdots, N)$$

$\boxed{\text{部 分 軸 選 択}}$

$$u_{1j} \leftarrow a_{1j}/l_{11} \quad (j = 1, 2, \cdots, N)$$

for　$k = 2, 3, \cdots, N$

$$l_{kk} \leftarrow a_{kk} - \sum_{m=1}^{k-1} l_{km} \cdot u_{mk}$$

for　$i = k+1, k+2, \cdots, N$

$$l_{ik} \leftarrow a_{ik} - \sum_{m=1}^{k-1} l_{im} \cdot u_{mk}$$

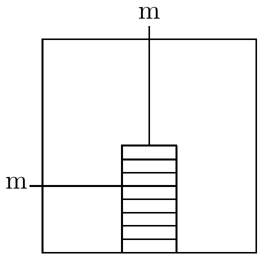
$\boxed{\text{部 分 軸 選 択}}$

for　$j = k+1, k+2, \cdots, N$

$$u_{kj} \leftarrow (a_{kj} - \sum_{m=1}^{k-1} l_{km} \cdot u_{mj})/l_{kk}$$

ここで, 部分軸選択とは分解を安定に行うためにピボット (pivot) がその列中最大になるように行を交換する操作である. 第 m 段目 (上記アルゴリズムで k=m の時) の操作は次のとおりである.

分解中の行列 $A$

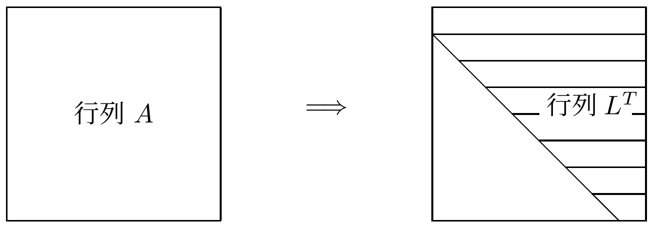



図中斜線の部分で絶対値最大の要素を選び, その要素の含まれている行と第 m 行とを交換する.

#### 2.1.3.2　コレスキー (Cholesky) 法

係数行列 $A$ を下三角行列 $L$ と上三角行列 $L^T$ の積に分解する.

$$A = LL^T$$




$$A = (a_{ij}), L = (l_{ij}), L^T = (l'_{ij}) \quad (i, j = 1, 2, \cdots, N)$$

とする. 行列 $A$ の右上三角部分に列方向のコレスキー法を施すと, アルゴリズムは以下のようになる.

for $k = 1, 2, \cdots, N$

　for $i = 1, 2, \cdots, k-1$

$$l'_{ik} \leftarrow (a_{ik} - \sum_{m=1}^{i-1} l'_{mi} \cdot l'_{mk})/l'_{ii}$$

$$l'_{kk} \leftarrow \sqrt{a_{kk} - \sum_{m=1}^{k-1} {l'_{mk}}^2}$$

行列演算は, 一般に内積型演算よりも外積型演算が適しており, さらにメモリアクセス回数を減少させるアンローリング技法を施すことにより演算効率が向上する (参考文献 (9) 参照).

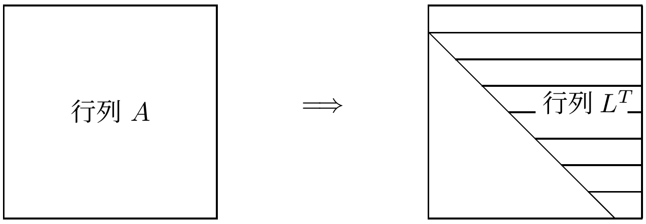
そのため 1 次元圧縮型行列の連立 1 次方程式において外積型演算のコレスキー法を採用した. さらにデータを行方向に格納することにより, データのアクセスが連続となるようにした.

#### 2.1.3.3　修正コレスキー法

係数行列 $A$ を下三角行列 $L$ , 対角行列 $D$ , および上三角行列 $L^T$ の積に分解する.

$$A = LDL^T$$

対角行列 $D$ は, 上三角行列 $L^T$ の対角成分の逆数を成分とする.




$$A = (a_{ij}), L = (l_{ij}), D = (d_{ij}), L^T = (l'_{ij}) \quad (i, j = 1, 2, \cdots, N)$$

とすると, アルゴリズムは以下のとおりである.

$$l'_{1j} \leftarrow a_{1j} \quad (j = 1, 2, 3, \cdots, N)$$

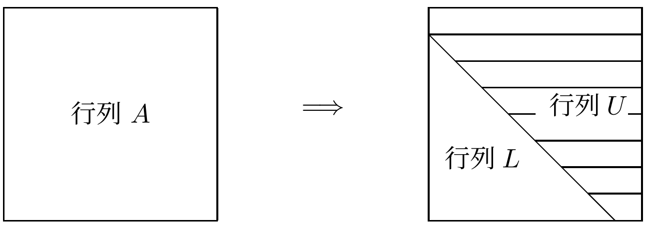
for $k = 2, 3, \cdots, N$
- for $i = 1, 2, \cdots, k-1$
  - $w_i \leftarrow l'_{ik}/l'_{ii}$
- for $j = k, k+1, \cdots, N$
  - $l'_{kj} \leftarrow a_{kj} - \sum_{m=1}^{k-1} w_m \cdot l'_{mj}$

$w$ はワークエリアであり, N 個の領域を必要とする.

#### 2.1.3.4 ガウス (Gauss) 法

係数行列 $A$ を単位下三角行列 $L$ と上三角行列 $U$ の積に分解する.

$$A = LU$$




本ライブラリでは部分軸選択を行うため, 実際は

$$PA = LU(P \text{ は行交換用置換行列})$$

となる.

$$A = (a_{ij}), L = (l_{ij}), U = (u_{ij}) \quad (i, j = 1, 2, \cdots, N)$$

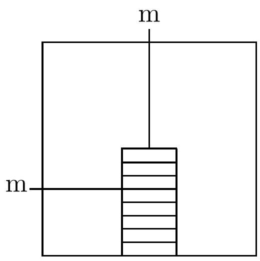
とすると, アルゴリズムは以下のとおりである.

for $k = 1, 2, \cdots, N$
- 部 分 軸 選 択
- for $i = k+1, k+2, \cdots, N$
  - $l_{ik} \leftarrow a_{ik}/u_{kk}$
  - for $j = k+1, k+2, \cdots, N$
    - $u_{ij} \leftarrow a_{ij} - l_{ik} \cdot u_{kj}$

ここで, 部分軸選択とは, 分解を安定に行うために, ピボット (pivot) がその列中最大になるように行を交換する操作である.

第 $m$ 段目 (上記アルゴリズムで $k = m$ のとき) の操作は次のとおりである.

分解中の行列 $A$




図中斜線の部分で絶対値最大の要素を選び, その要素の含まれている行と第 $m$ 行との, 第 $m$ 列目から第 $N$ 列目までを交換する.

#### 2.1.3.5 Levinson の方法

Toeplitz 行列 $R$

$$R = \begin{bmatrix} r_0 & r_{-1} & r_{-2} & \cdots & r_{-n+2} & r_{-n+1} \\ r_1 & r_0 & r_{-1} & \cdots & r_{-n+3} & r_{-n+2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & & \ddots & \vdots & \vdots \\ r_{n-2} & r_{n-3} & r_{n-4} & \cdots & r_0 & r_{-1} \\ r_{n-1} & r_{n-2} & r_{n-3} & \cdots & r_1 & r_0 \end{bmatrix}$$

を係数行列とする連立 1 次方程式

$$\sum_{j=1}^{n} r_{i-j} x_j = b_i \quad (i = 1, \cdots, n)$$

は次の様な $n$ 個の連立 1 次方程式

$$\sum_{j=1}^{m} r_{i-j} x_j^{(m)} = b_i \quad (i = 1, \cdots, m;\ m = 1, 2, \cdots, n)$$

の解 $x_j^{(m)}$ $(j = 1, \cdots, m;\ m = 1, 2, \cdots, n)$ を考えることによって次の様に解くことができる.

(1) 初期解 $(m = 1)$

$$x_1^{(1)} = \frac{b_1}{r_0}$$

$$g_1^{(1)} = \frac{r_{-1}}{r_0}$$

$$h_1^{(1)} = \frac{r_1}{r_0}$$

(2) $m = 2, 3, \cdots, n$ について以下を逐次繰り返し計算する.

$$x^{(nu)} = \sum_{j=1}^{m-1} r_{m-j} x_j - b_m$$

$$x^{(de)} = \sum_{j=1}^{m-1} r_{m-j} g_{m-j}^{(m-1)} - r_0$$

$$x_m^{(m)} = \frac{x^{(nu)}}{x^{(de)}}$$

$$x_j^{(m)} = x_j^{(m-1)} - x_m^{(m)} g_{m-j}^{(m-1)} \quad (j = 1, 2, \cdots, m-1)$$

$$g^{(nu)} = \sum_{j=1}^{m-1} r_{j-m} g_j^{(m-1)} - r_{-m}$$

$$g^{(de)} = \sum_{j=1}^{m-1} r_{j-m} h_{m-j}^{(m-1)} - r_0$$

$$h^{(nu)} = \sum_{j=1}^{m-1} r_{m-j} h_j^{(m-1)} - r_m$$

$$g_m^{(m)} = \frac{g^{(nu)}}{g^{(de)}}$$

$$h_m^{(m)} = \frac{h^{(nu)}}{x^{(de)}}$$

$$g_j^{(m)} = g_j^{(m-1)} - g_m^{(m)} h_{m-j}^{(m-1)} \quad (j = 1, 2, \cdots, m-1)$$

$$h_j^{(m)} = h_j^{(m-1)} - h_m^{(m)} g_{m-j}^{(m-1)} \quad (j = 1, 2, \cdots, m-1)$$

求める解は $x_j = x_j^{(n)}$ として求められる．なお, 対称 Toeplitz 行列の場合には

$$r_i = r_{-i} \quad (i = 1, 2, \cdots, n)$$

であるので

$$g_j^{(m)} = h_j^{(m)} \quad (j = 1, 2, \cdots, m;\ m = 1, 2, \cdots, n)$$

が成立し, 一般の場合よりも効率良く計算を進めることができる．なお, この方法は行列の性質を十分活用しているので一般のガウス消去法よりもメモリ使用量や計算効率の点で優れているが, 反面, 行列が正則であっても原理的に解を求められない場合がある．例えば, $r_0 = 0$ の場合には明らかにこの方法で解を得ることはできない.

#### 2.1.3.6 Vandermonde 行列

相異なる $n$ 個の要素 $v_k$ $(k = 1, 2, \cdots, n)$ で構成される $n$ 次の Vandermonde 行列 $V$

$$V = \begin{bmatrix} 1 & v_1 & v_1^2 & \cdots & v_1^{n-2} & v_1^{n-1} \\ 1 & v_2 & v_2^2 & \cdots & v_2^{n-2} & v_2^{n-1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & & \ddots & \vdots & \vdots \\ 1 & v_{n-1} & v_{n-1}^2 & \cdots & v_{n-1}^{n-2} & v_{n-1}^{n-1} \\ 1 & v_n & v_n^2 & \cdots & v_n^{n-2} & v_n^{n-1} \end{bmatrix}$$

を係数行列とする連立 1 次方程式 $V\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$:

$$\sum_{j=1}^{n} v_i^{j-1} x_j = b_i \quad (i = 1, \cdots, n)$$

を解くことを考える．いま, $n-1$ 次の多項式 $P_i^{(n)}(x)$ を

$$P_i^{(n)}(x) = \prod_{\substack{k=1\\(k\neq i)}}^{n} \frac{x-v_k}{v_i-v_k} = \sum_{j=1}^{n} u_{i,j}x^{j-1}$$

と定義すると, $P_i^{(n)}(v_k) = \delta_{ik}$ (ここで, $\delta_{ik}$ はクロネッカーのデルタ) が成立するので, この多項式の $x^{j-1}$ の項の係数からなる行列を $U = \{u_{i,j}\}$ とすると, $UV^T = E(E$ は単位行列) すなわち $V^{-1} = U^T$ が成立する．したがって, 与えられた連立 1 次方程式 $V\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ の解 $\boldsymbol{x}$ は

$$\boldsymbol{x} = U^T\boldsymbol{b}$$

を計算することによって得られる．いま, $U$ の各係数を計算するために次式で定義されるマスター多項式 $P^{(n)}(x)$ を考える．

$$P^{(n)}(x) = \prod_{k=1}^{n}(x-v_k)$$

マスター多項式 $P^{(n)}(x)$ の $x^{j-1}$ の項の係数を $w_{n-j+1}^{(n)}$ とおいて

$$P^{(n)}(x) = x^n + w_1^{(n)}x^{n-1} + \cdots + w_{n-1}^{(n)}x + w_n^{(n)}$$

と表す．$P^{(i)}(x) = (x-v_i)P^{(i-1)}(x)$ $(i = 2, 3, \cdots, n)$ の関係から, $x^{j-1}$ についての係数を比較することによって, 次の関係が得られる．

$$w_1^{(i)} = w_1^{(i-1)} - v_i \quad (i = 2, \cdots, n)$$

$$w_j^{(i)} = w_j^{(i-1)} - v_i w_{j-1}^{(i-1)} \quad (j = i, i-1, \cdots, 2;\ i = 2, 3, \cdots, n)$$

ただし,

$$w_1^{(1)} = -v_1$$

$$w_j^{(j-1)} = 0 \quad (j = 2, 3, \cdots, n)$$

としている．以上から, マスター多項式の各係数を計算できる．一方,

$$\frac{dP^{(n)}(x)}{dx}|_{x=v_i} = \prod_{\substack{k=1\\(k\neq i)}}^{n}(v_i-v_k)$$

が成立するがこの値は,

$$\frac{dP^{(n)}(x)}{dx}|_{x=v_i} = n{v_i}^{n-1} + (n-1)w_1^{(n)}{v_i}^{n-2} + \cdots + w_{n-1}^{(n)}$$

から計算できる．また,

$$P_i^{(n)}(x) = \frac{P^{(n)}(x)}{(x-v_i)\frac{dP^{(n)}(x)}{dx}|_{x=v_i}}$$

であるので, この多項式の $x^{j-1}$ の項の係数 $u_{i,j}$ は $\dfrac{P^{(n)}(x)}{(x-v_i)}$ の $x^{j-1}$ の項の係数を組み立て除法を用いて計算することによって得ることができる．なお, Vandermonde 行列を係数とする連立 1 次方程式は本質的に悪条件であり, $n$ が極めて小さい場合以外は解を精度良く求めることは難しい．

#### 2.1.3.7 サイクリック・リダクション法

(1) サイクリック・リダクション法

実 3 重対角行列 $A$ を係数行列とする連立 1 次方程式

$$A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \tag{2.1}$$

を解く．ここで,

$$A = \begin{bmatrix} d_1 & u_1 & & & 0 \\ \ell_2 & d_2 & u_2 & & \\ & \cdot & \cdot & \cdot & \\ & & \cdot & \cdot & u_{n-1} \\ & 0 & & \ell_n & d_n \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ x_n \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{b} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ b_n \end{bmatrix}$$

とすると

$$\ell_i x_{i-1} + d_i x_i + u_i x_{i+1} = b_i \tag{2.2}$$

となる．

このアルゴリズムでは, 次数が半分の連立 1 次方程式を作り出すリダクション操作を $\lfloor \log_2(n) \rfloor$ 回繰り返すことで最終的に次数 1 の方程式を作り出せる．よって解が 1 つ求まる．

$$\boldsymbol{d}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$$

$$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}/\boldsymbol{d} \tag{2.3}$$

この解をもとに後退代入を繰り返せばすべての解が得られる．ただし, 記号 $\lfloor x \rfloor$ は $x$ を超えない最大の整数を表す．

次に, サイクリック・リダクション法のリダクション操作及び後退代入について述べる．

(a) リダクション操作

まず, はじめに $n = 2^m - 1$ とする．

(2.1) の偶数行を中心に前後の行との 3 行から $x_{i-1}$ と $x_{i+1}$ を消去する．すなわち,

$$\begin{cases} \ell_{i-1}x_{i-2} + d_{i-1}x_{i-1} + u_{i-1}x_i = b_{i-1} \\ \ell_i x_{i-1} + d_i x_i + u_i x_{i+1} = b_i \\ \ell_{i+1}x_i + d_{i+1}x_{i+1} + u_{i+1}x_{i+2} = b_{i+1} \end{cases} , i \text{ は偶数}$$

の 3 行から次式を得る．

$$\ell'_i x_{i-2} + d'_i x_i + u'_i x_{i+2} = b'_i \tag{2.4}$$

$$\begin{cases} \ell'_i &= d_{i+1}\ell_{i-1}\ell_i \\ u'_i &= d_{i-1}u_i u_{i+1} \\ d'_i &= \ell_i d_{i+1} u_{i-1} + \ell_{i+1} d_{i-1} u_i - d_{i-1} d_i d_{i+1} \\ b'_i &= \ell_i d_{i+1} b_{i-1} + d_{i-1} u_i b_{i+1} - d_{i-1} d_{i+1} b_i \end{cases}$$

(2.1) に含まれるすべての偶数行について (2.4) を適用すると $(x_0 = x_{n+1} = 0)$, $\lfloor n/2 \rfloor$ の実 3 重対角行列を係数行列とする連立 1 次方程式が得られる．

次に, $n = 2^m$ を考える. $n = 2^m - 1$ の場合はすべての偶数行において (2.4) が適用できるが, $n = 2^m$ の場合は $n-1$ 行が奇数行になるので $n-1$ 行と $n$ 行については (2.4) が適用できない. そこで,

$$\begin{cases} \ell_{n-1}x_{n-2} & + & d_{n-1}x_{n-1} & + & u_{n-1}x_n & = b_{n-1} \\ & & \ell_n x_{n-1} & + & d_n x_n & = b_n \end{cases}$$

の 2 行から $x_{n-1}$ を消去した次式を適用する.

$$\ell'_n x_{n-2} + d'_n x_n = b'_n \tag{2.5}$$

$$\begin{cases} \ell'_n & = \ell_{n-1}\ell_n \\ d'_n & = \ell_n u_{n-1} - d_n d_{n-1} \\ b'_n & = \ell_n b_{n-1} - d_{n-1} d_n \end{cases}$$

したがって, $n$ の値によらず $\lfloor n/2 \rfloor$ の実 3 重対角行列を係数行列とする連立 1 次方程式に縮小することができる.

(b) 後退代入

リダクション操作によって求まった解 (2.3) をもとにリダクション操作によってできた各々の連立 1 次方程式からリダクション操作とは逆方向に解を求めていく. もし, 偶数行の解が求まっていれば奇数行の解は,

$$x_{i-1} = (b_{i-1} - \ell_{i-1}x_{i-2} - u_{i-1}x_i)/d_{i-1}, \quad i = 2, 4, 6, \cdots, n+1$$

より求められる.

(2) サイクリック・リダクション法の高速化について

サイクリック・リダクション法は, ガウス (Gauss) 法のような漸化式になっていないので計算式に独立性があり, 本質的にベクトル化が可能となるが, さらに以下のようなベクトル化をほどこしている.

(a) 定係数型サイクリック・リダクション法の高速化について

ディリクレ境界値問題やノイマン境界値問題を離散化するときに現れる係数行列に対しては, サイクリック・リダクション法を変形した定係数型サイクリック・リダクション法を採用することにより, さらに高速化が可能となった. 以下に, 定係数型サイクリック・リダクション法について述べる.

第一に, 係数行列が

$$\begin{bmatrix} d & s & & & 0 \\ s & d & s & & \\ & \cdot & \cdot & \cdot & \\ & & \cdot & \cdot & s \\ 0 & & & s & d \end{bmatrix}, \quad d \neq 0, \quad s \neq 0 \tag{2.6}$$

$$\begin{bmatrix} d & s & & & 0 \\ s & d & s & & \\ & \cdot & \cdot & \cdot & \\ & & \cdot & \cdot & s \\ 0 & & & 2\cdot s & d \end{bmatrix}, \quad d \neq 0, \quad s \neq 0 \tag{2.7}$$

の場合, (2.7) の最終行を 2 で正規化した行列と (2.6) と比較すると, 最終行だけ異なり他行は同じであることがわかる. そこで, (2.6) と (2.7) を次の (2.8) に置き換えて考える.

$$\begin{bmatrix} d & s & & & 0 \\ s & d & s & & \\ & \cdot & \cdot & \cdot & \\ & & \cdot & d & s \\ 0 & & & s & e \end{bmatrix}, \quad d \neq 0, \quad s \neq 0, \quad e \neq 0 \tag{2.8}$$

まず, はじめに $n = 2^m - 1$ とする.

(2.7) の偶数行を中心に前後の行との 3 行から $x_{i-1}$ と $x_{i+1}$ を消去する. すなわち,

$$
\begin{cases}
sx_{i-2} + dx_{i-1} + sx_i = b_{i-1} \\
sx_{i-1} + dx_i + sx_{i+1} = b_i & ,i\ \text{は偶数} \\
sx_i + dx_{i+1} + sx_{i+2} = b_{i+1}
\end{cases}
$$

の 3 行から次式を得る.

$$
s'x_{i-2} + d'x_i + s'x_{i+2} = b'_i \tag{2.9}
$$

$$
\begin{cases}
s' &= s^2 \\
d' &= 2 \cdot s^2 - d^2 \\
b' &= s(b_{i-1} + b_{i+1}) - db_i
\end{cases}
$$

(2.8) に含まれる偶数行について (2.9) を適用すると $(x_0 = x_{n+1} = 0)$, $\lfloor n/2 \rfloor$ の実 3 重対角行列を係数行列とする連立 1 次方程式が得られる. ただし, $n-1$ 行については

$$
s'x_{n-3} + e'x_{n-1} = b'_{n-1} \tag{2.10}
$$

$$
\begin{cases}
s' &= e \cdot s^2 \\
e' &= e \cdot s^2 - e \cdot d^2 + d \cdot s^2 \\
b'_{n-1} &= e \cdot s \cdot b_{n-2} - e \cdot d \cdot b_{n-1} + d \cdot s \cdot b_n
\end{cases}
$$

となる.

次に, $n = 2^m$ を考える. $n = 2^m$ の場合は $n-1$ 行が奇数行になるので (2.10) の代わりに

$$
\begin{cases}
sx_{n-2} + dx_{n-1} + sx_n = b_{n-1} \\
sx_{n-1} + ex_n = b_n
\end{cases}
$$

の 2 行から $x_{n-1}$ を消去した次式を適用する.

$$
s'x_{n-2} + e'x_n = b_{n-1} \tag{2.11}
$$

$$
\begin{cases}
s' &= s^2 \\
d' &= s^2 - d \cdot e \\
b'_{n-1} &= s \cdot b_{n-1} - d \cdot b_n
\end{cases}
$$

したがって, $n$ の値によらず $\lfloor n/2 \rfloor$ の実 3 重対角行列を係数行列とする連立 1 次方程式に縮小することができる. この操作を $\lfloor \log_2(n) \rfloor$ 回繰り返すことで最終的に次数 1 の方程式を作りだせる. よって解が一つ求まる.

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{dx} &= \boldsymbol{b} \\
\boldsymbol{x} &= \boldsymbol{b}/\boldsymbol{d}
\end{aligned}
$$

この解をもとに後退代入を繰り返すことですべての解を求める. もし偶数行の解が求まっていれば奇数行の解は,

$$
x_{i-1} = (b_{i-1} - s \cdot x_{i-2} - s \cdot x_i)/d, \quad i = 2, 4, 6, \cdots, n+1
$$

より求められる.

第二に, 係数行列が

$$
\begin{bmatrix}
d & 2 \cdot s & & & 0 \\
s & d & s & & \\
& \cdot & \cdot & \cdot & \\
& & \cdot & \cdot & s \\
0 & & & s & d
\end{bmatrix}
, \quad d \neq 0, \quad s \neq 0 \tag{2.12}
$$

$$\begin{bmatrix} d & 2\cdot s & & & 0 \\ s & d & s & & \\ & \cdot & \cdot & \cdot & \\ & & \cdot & \cdot & s \\ 0 & & & 2\cdot s & d \end{bmatrix}, \quad d \neq 0, \quad s \neq 0 \tag{2.13}$$

の場合, (2.13) の最終行を 2 で正規化した行列と (2.12) を比較すると, 最終行だけ異なり他行は同じであることがわかる．そこで, (2.12) と (2.13) を次の (2.14) に置き換えて考える．

$$\begin{bmatrix} d & 2\cdot s & & & 0 \\ s & d & s & & \\ & \cdot & \cdot & \cdot & \\ & & \cdot & d & s \\ 0 & & & s & e \end{bmatrix}, \quad d \neq 0, \quad s \neq 0, \quad e \neq 0 \tag{2.14}$$

今度は偶数行ではなく奇数行を中心に考える．

はじめに第 1 行と第 2 行から $x_2$ を消去する．すなわち,

$$\begin{cases} dx_1 & + & 2\cdot sx_2 & & & = b_1 \\ sx_1 & + & dx_2 & + & sx_3 & = b_2 \end{cases}$$

の 2 行から次式を得る．

$$(d^2 - 2\cdot s^2)x_1 - 2\cdot s^2 x_3 = db_1 - 2sb_2 \tag{2.15}$$

次に, (2.14) の第 $2i$ 行, 第 $2i+1$ 行, 第 $2i+2$ 行の 3 行から $x_{2i}, x_{2i+2}$ を消去する．

すなわち,

$$\begin{cases} sx_{2i-1} & + & dx_{2i} & + & sx_{2i+1} & & & & & = b_{2i} \\ & & sx_{2i} & + & dx_{2i+1} & + & sx_{2i+2} & & & = b_{2i+1} \\ & & & & sd_{2i+1} & + & sx_{2i+2} & + & sx_{2i+3} & = b_{2i+2} \end{cases}$$

の 3 行から次式を得る．

$$s'x_{2i-1} + d'x_{2i+1} + s'x_{2i+3} = b'_{2i+1} \tag{2.16}$$

$$\begin{cases} s' & = & s^2 \\ d' & = & 2\cdot s^2 - d^2 \\ b'_{2i+1} & = & s\cdot b_{2i} - d\cdot b_{2i+1} + s\cdot b_{2i+2} \end{cases}$$

これを $i = 1, 2, \cdots, m$ (ただし, $m$ は $2i+1 \leq n-2$ を満たす最大の $i$) の各々について行う．

最後に, $n = 2^m$ の場合には $n-2$ 行, $n-1$ 行, $n$ 行の 3 行から $x_{n-2}, x_n$ を消去して (2.17) を得る．また, $n = 2^m - 1$ の場合には $n-1$ 行が偶数行になるので $n-1$ 行, $n$ 行の 2 行から $x_{n-1}$ を消去して (2.18) を得る．すなわち, $n = 2^m$ のとき

$$\begin{cases} sx_{n-3} & + & dx_{n-2} & + & sx_{n-1} & & & = b_{n-2} \\ & & sx_{n-2} & + & dx_{n-1} & + & sx_n & = b_{n-1} \\ & & & & sx_{n-1} & + & ex_n & = b_n \end{cases}$$

の 3 行から次式を得る．

$$s'x_{n-3} + e'x_{n-1} = b'_{n-1} \tag{2.17}$$

$$\begin{cases} s' & = e\cdot s^2 \\ e' & = e\cdot s^2 - e\cdot d^2 + d\cdot s^2 \\ b'_{n-1} & = s\cdot e\cdot b_{n-2} - d\cdot e\cdot b_{n-1} + d\cdot s\cdot b_n \end{cases}$$

$n = 2^m - 1$ のとき

$$\begin{cases} sx_{n-2} & + & dx_{n-1} & + & sx_n & = b_{n-1} \\ & & sx_{n-1} & + & ex_n & = b_n \end{cases}$$

の 2 行から次式を得る.

$$s'x_{n-2} + e'x_n = b'_n \tag{2.18}$$

$$\begin{cases} s' & = & s^2 \\ e' & = & s^2 - e \cdot d \\ b'_n & = & s \cdot b_{n-1} - d \cdot b_n \end{cases}$$

したがって, $n$ の値によらず $\lfloor (n-1)/2 \rfloor + 1$ の実 3 重対角行列を係数行列とする連立 1 次方程式に縮小することができる. この操作を $\lfloor \log_2(n-1) \rfloor$ 回繰り返すことで最終的に

$$\begin{bmatrix} d^{(m)} & 2 \\ 1 & e^{(m)} \end{bmatrix}, \quad m = \lfloor (n-1)/2 \rfloor + 1$$

を係数行列とする方程式が得られる. これを解いて後退代入を繰り返せばすべての解が求められる.

(b) リダクション操作の打ち切り

リダクション操作を繰り返していくと, ある仮定 (十分条件にはなるが必要ではない) のもとで対角要素の値が大きくなり, リダクション操作の途中の段階で対角要素と副対角要素との比が $1/E_{PS}$ ($E_{PS}$ : 誤差判定のための単位) より大きくなることがある.

上記仮定の一つとして

$$\mid l_i^{(k)} \mid, \mid u_i^{(k)} \mid < \mid d_i^{(k)}/2 \mid, \quad 1 \le i \le n \tag{2.19}$$

を考える. ここで, $l_i^{(k)}$, $d_i^{(k)}$, $u_i^{(k)}$ は $k$ 番目のリダクション操作後の係数行列の第 $i$ 行における下副対角成分, 対角成分, 上副対角成分とする. これらの仮定が保たれると係数行列を

$$(\cdots, {l_i}^{(k)}/{d_i}^{(k)}, 1, {u_i}^{(k)}/{d_i}^{(k)}, \cdots) \tag{2.20}$$

に正規化する. そうすると, 副対角要素は $E_{PS}$ 程度まで小さくなることがあり, リダクション操作の途中で定数ベクトル $\boldsymbol{b}^{(k)}$ ($k$ : リダクション回数) がいくつかの解に収束していく.

したがって, リダクション操作を行う前にあらかじめ収束時のリダクション回数がわかっていれば最後までリダクション操作を行う必要はなく, リダクション操作を途中でやめて後退代入に移れば計算時間が短縮されることになり効率がよい. これをサイクリック・リダクション操作の打ち切りという.

以下に打ち切りまでのリダクション回数を求めるために (2.19) を満足する場合の収束の下限を調べる.

まず, $\boldsymbol{e} = \max_i({l_i}^{(k)}/{d_i}^{(k)}, {u_i}^{(k)}/{d_i}^{(k)})$ を求め (2.20) のすべての ${l_i}^{(k)}/{d_i}^{(k)}, {u_i}^{(k)}/{d_i}^{(k)}$ を $\boldsymbol{e}$ に置き換えた行列 $(\cdots, \boldsymbol{e}, 1, \boldsymbol{e}, \cdots)$ を考える. これは, $(\cdots, 1, \boldsymbol{d}, 1, \cdots)$ のような係数行列を考えれば十分だろう. 収束の割合を決定するために

$$\boldsymbol{\varepsilon}^{(k)} = \mid \boldsymbol{d}^{(k)} \mid -2 > 0$$

と定義する. $\boldsymbol{d}^{(k)}$ は $k$ 番目の反復中に計算された対角要素である. ここで, $\mid \boldsymbol{d}^{(k)} \mid$ が $k$ の関数として $1/E_{PS}$ の方向へ大きくなっていくか測定してみる. (2.9) から

$$\boldsymbol{d}^{(k+1)} = 2 - \left[\boldsymbol{d}^{(k)}\right]^2$$

の絶対値をとると,

$$\mid \boldsymbol{d}^{(k+1)} \mid = \mid 2 - \left[2 + \boldsymbol{\varepsilon}^{(k)}\right]^2 \mid \ge 2 + 4\boldsymbol{\varepsilon}^{(k)} + \left[\boldsymbol{\varepsilon}^{(k)}\right]^2$$

となるので

$$\varepsilon^{(k+1)} > 4\varepsilon^{(k)} + \left[\varepsilon^{(k)}\right]^2 \tag{2.21}$$

となる.

このことから,

- $\varepsilon^{(k)} < 1$ のとき,
  $\varepsilon^{(k+1)} > 4\varepsilon^{(k)}$ となり, 増大の割合が少なくとも 1 次の速さ
- $\varepsilon^{(k)} > 1$ のとき,
  $\varepsilon^{(k+1)} > \left[\varepsilon^{(k)}\right]^2$ となり, 増大の割合が少なくとも 2 次の速さ

であることがわかる.

したがって, (2.21) から求められる $\varepsilon^{(k)}$ が

$$\varepsilon^{(k)} \geq 1/E_{PS}$$

となる最小の整数 $k$ を打ち切りまでのリダクション回数とする. なお, $k \geq \lfloor \log_2(n) \rfloor$ のときは打ち切りは起こらない.

(3) **補足事項**

- 計算時間への影響

  条件 (2.19) を満たさない (対角要素が強くない) 実 3 重対角行列の連立 1 次方程式においては, 計算の過程で特異性を持つか否かの判定を行う. そのため, 対角要素が強い係数行列を持つ場合に比べ計算時間がかかる.

#### 2.1.3.8 逆行列の算出方法

行列 $A$ の逆行列を算出するには, その三角分解を利用して行う.

$A = LU$ と分解された場合, まず第一段階として $L^{-1}$ または $U^{-1}$ を掃出し法によって求め, 次に第二段階としてその結果を変形して $A^{-1} = U^{-1}L^{-1}$ を計算する.

第二段階の操作は, 三角分解時の変換行列を $L^{-1}$ または, $U^{-1}$ の反対側から施したものとなる.

たとえば, コレスキー法の場合,

$$L^{-1}A = L^T$$

として $L^T$ を求めているので, $A^{-1}$ は $(L^T)^{-1}$ に分解時の変換行列 $L^{-1}$ を右側から掛けることによって求められる.

第一段階で $L^{-1}$ と $U^{-1}$ のどちらを計算するかは, 三角分解の手法によって異なる.

#### 2.1.3.9 行列式の値の算出方法

行列式の値は, 以下のように求められる.

$A = LU$ と分解されたとき,

$$det(A) = det(L) \cdot det(U) = \prod_{i=1}^{n} l_{ii} \cdot \prod_{i=1}^{n} u_{ii}$$

ただし, $L = (l_{ij})$, $U = (u_{ij})$ とする.

#### 2.1.3.10 解の改良

連立 1 次方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ の解を改良することを考える. 最初求められた解を $\boldsymbol{x}^{(1)}$ とすると, 計算誤差のため,

$$A\boldsymbol{x}^{(1)} \neq \boldsymbol{b}$$

である. そこでこの $\boldsymbol{x}^{(1)}$ を改良するため, 以下のアルゴリズムを使用する.

(1) $\boldsymbol{r}^{(k)} = \boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}^{(k)}$

(2) $A\boldsymbol{y}^{(k)} = \boldsymbol{r}^{(k)}$

(3) $\boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{x}^{(k)} + \boldsymbol{y}^{(k)} \quad (k = 1, 2, \cdots)$

この反復において, (2) で丸め誤差が発生する. 従って (2) の式は, 正確には

$$(A + E)\boldsymbol{y}^{(k)} = \boldsymbol{r}^{(k)}$$

となる. この式と (1), (3) より,

$$\boldsymbol{x}^{(k+1)} - \boldsymbol{x} = [I - (A + E)^{-1}A]^k(\boldsymbol{x}^{(1)} - \boldsymbol{x})$$

$$\boldsymbol{r}^{(k+1)} = [I - A(A + E)^{-1}]\boldsymbol{r}^{(k)}$$

が導かれる.

従って $\|E\| \, \|A^{-1}\| < \dfrac{1}{2}$ を満たせば,

$$\begin{matrix} \boldsymbol{x}^{(k+1)} \to \boldsymbol{x} \\ \boldsymbol{r}^{(k+1)} \to 0 \end{matrix} \quad (k \to \infty)$$

となる.

なお, $\dfrac{\|\boldsymbol{y}^{(k)}\|_\infty}{\|\boldsymbol{x}^{(k+1)}\|_\infty} > \dfrac{1}{2} \cdot \dfrac{\|\boldsymbol{y}^{(k-1)}\|_\infty}{\|\boldsymbol{x}^{(k)}\|_\infty}$ となった場合, 解は収束しない. 詳細は参考文献 (7) を参照されたい.

#### 2.1.3.11 近似解の精度推定

近似解 $\boldsymbol{x}^{(k)}$ について考える.

$$\boldsymbol{y}^{(k)} = (A + E)^{-1}(\boldsymbol{b} - A\boldsymbol{x}^{(k)}) = (I + A^{-1}E)^{-1}(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^{(k)})$$

である. ところで解の相対誤差 $\dfrac{\|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^{(k)}\|_\infty}{\|\boldsymbol{x}^{(k)}\|_\infty}$ は, 解が十分収束し, 行列 $A$ の条件のよい場合は $\dfrac{\|\boldsymbol{y}^{(k)}\|_\infty}{\|\boldsymbol{x}^{(k)}\|_\infty}$ で置きかえられる.

#### 2.1.3.12 条件数

(1) **条件数とその使用方法**

行列 $A$ の条件数 $\kappa(A)$ とは, 連立 1 次方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ を解く場合, その係数行列 $A$ または定数ベクトル $\boldsymbol{b}$ に含まれる誤差が解に与える影響の程度を示す数値であり, 次の式で与えられる.

$$\kappa(A) = \|A\| \cdot \|A^{-1}\|$$

係数行列 $A$ に誤差 $E$ が含まれるとき, 求められた解 $\boldsymbol{y}$ の真の解 $\boldsymbol{x}$ に対する相対誤差は, 次の範囲にある.

$$\frac{\|\boldsymbol{y} - \boldsymbol{x}\|}{\|\boldsymbol{y}\|} \leq \kappa(A) \cdot \varepsilon$$

ただし, $\varepsilon = \dfrac{\|E\|}{\|A\|}$ である.
また, 定数ベクトル $\boldsymbol{b}$ に誤差 $\boldsymbol{e}$ が含まれるとき, 相対誤差は次の範囲にある.

$$\frac{\|\boldsymbol{y}-\boldsymbol{x}\|}{\|\boldsymbol{x}\|} \le \kappa(A)\cdot\varepsilon$$

ただし, $\varepsilon = \dfrac{\|\boldsymbol{e}\|}{\|\boldsymbol{b}\|}$ とする.
従って, 条件数が $10^{\alpha}$ のオーダーのとき求められた解の精度は, 元のデータの精度よりも約 $\alpha$ ケタ減少する可能性がある.
本ライブラリでは, 条件数の逆数を求め変数 COND に格納している. 利用者はこの COND の値が著しく小さいような係数行列をもつ連立 1 次方程式については, 解が求められたとしても精度は悪くなっていることに注意しなければならない. 特に以下の判別式が成り立つときは, その行列は計算機上特異であり解は信用できない.

(特異な行列の判別式) :

1.0 + COND $\simeq$ 1.0

(2) **条件数の算出方法**

条件数 $k(A)$ は,

$$\kappa(A) = \|A\|\cdot\|A^{-1}\|$$

であるが, 本ライブラリでは $A^{-1}$ は求めずに $\|A^{-1}\|$ の概算を行い, それを $\|A\|$ に掛け合わせる方法を採用している.
$A$ の特異値分解を

$$A = U\Sigma V^T$$

$U, V$ : 直交行列

$$\Sigma = \begin{bmatrix} \sigma_1 & & & 0 \\ & \ddots & & \\ & & \ddots & \\ & & & \ddots & \\ 0 & & & & \sigma_n \end{bmatrix}$$

$\sigma_i$ : 特異値

$\sigma_1 \ge \sigma_2 \ge \cdots \ge \sigma_n$

とする. 今, $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{y}$ という方程式系を考える. $\boldsymbol{y}$ を $U$ の列ベクトルを基底として

$$\boldsymbol{y} = \|\boldsymbol{y}\|\sum_{i=1}^{n}\alpha_i\boldsymbol{u}_i \qquad (\sum_i {\alpha_i}^2 = 1)$$

と表すと,

$$\|A^{-1}\| \ge \frac{\|\boldsymbol{x}\|}{\|\boldsymbol{y}\|} = [\sum_{i=1}^{n}\left(\frac{\alpha_i}{\sigma_i}\right)^2]^{\frac{1}{2}}$$

が成り立つ. 右辺は, $\alpha_n$ が特に小さくない限り, $\boldsymbol{y}$ がどのようなベクトルでも $\sigma_n^{-1}(=\|A^{-1}\|)$ 程度の大きさをもつ.

本ライブラリにおいては, この近似値がさらによいものになるように, $\boldsymbol{y}$ を選定している.

上記の不等式で等号が成り立つのは, $\boldsymbol{y} = \boldsymbol{u}_n(\alpha_n = 1, \alpha_i = 0, i = 1, 2, \cdots, n-1)$ のときである. よって, $\boldsymbol{y}$ が $\boldsymbol{u}_n$ を主要な要素としてもつように $\boldsymbol{y}$ を決定すればよい. 実際には,

$$\boldsymbol{z} = \begin{bmatrix} \pm 1 \\ \pm 1 \\ \vdots \\ \pm 1 \end{bmatrix}$$

として, $A^T\boldsymbol{y} = \boldsymbol{z}$ で $\dfrac{\|\boldsymbol{y}\|}{\|\boldsymbol{z}\|}$ が最大になるように $\boldsymbol{z}$ の各要素の符号を定め, $\boldsymbol{y}$ を求める.

この $\boldsymbol{y}$ を使用して $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{y}$ を解き, $\dfrac{\|\boldsymbol{x}\|}{\|\boldsymbol{y}\|}$ を $\|A^{-1}\|$ の近似値とする.
条件数を求める具体的な手順を以下に示す.

(a) $\|A\|$ を求める.

(b) $A = LU$ と三角分解する.

(c) $U^T\boldsymbol{w} = \boldsymbol{z}$ で $\dfrac{\|\boldsymbol{w}\|}{\|\boldsymbol{z}\|}$ が最大になるように $\boldsymbol{z}$ を決定し, $\boldsymbol{w}$ を求める.

(d) $L^T\boldsymbol{y} = \boldsymbol{w}$ を解き, $\boldsymbol{y}$ を求める.

(e) $LU\boldsymbol{x} = \boldsymbol{y}$ を解き, $\boldsymbol{x}$ を求める.

(f) $\dfrac{\|\boldsymbol{y}\|}{\|\boldsymbol{x}\| \cdot \|A\|}$ (条件数の逆数) を求め, 引数 COND に値を格納する.

詳細は参考文献 (3) を参照されたい.

### 2.1.4 参考文献


(1) Wilkinson, J. H. and Reinsch, C. , “Handbook for Automatic Computation, vol II, Linear Algebra”, Springer-Verlag, (1971).

(2) Dahlquist, G. and Björck, Å. , “Numerical Methods”, translated by N. Anderson, Prentice-Hall, Inc. , (1974).

(3) Cline, A. K. , Moler, C. B. , Stewart, G. W. and Wilkinson, J. H. , “An estimate for the condition number of a matrix”, SIAM Numerical Analysis Vol. 16, pp. 368-375, (1979).

(4) Dongarra, J. J. , Moler, C. B. , Bunch, J. R. and Stewart, G. W. , “LINPACK Users’ Guide”, SIAM, (1979).

(5) Forsythe, G. E. and Moler, C. B. , “線形計算の基礎” 渋谷政昭 他訳, 培風館.

(6) 戸川隼人, “マトリクスの数値計算”, オーム社, (1971).

(7) Wilkinson, J. H. , “丸め誤差解析”, 一松信 他訳, 培風館.

(8) Robert, Y. and Sguazzero, P. “The LU decomposition algorithm and its efficient FORTRAN implementation on IBM3090 Vector Multiprocessor”, IBM Tech. Rep. , ICE-0006(1987).

(9) 高橋幸夫, 怡土好夫, 坂井日出雄, 花村光泰, 萬淳一, 津和義昭, “スーパーコンピュータ SX システムに適した高速化技法”, 情報処理学会第 32 回全国大会講演集, (1986).

(10) STONE, HAROLD. S. , “Parallel Tridiagonal Equation Solvers”, ACM Transactions on Mathematical Software, Vol. 1, No. 4, 289, (1975).

(11) Hockney, R. W. and Jesshope, C. R. , “並列計算機”

## 2.2 実行列 (2 次元配列型)

### 2.2.1 DBGMSM, RBGMSM<br>多重右辺連立 1 次方程式 (実行列)

(1) **機 能**

実行列 $A$(2 次元配列型) を係数行列とする連立 1 次方程式 $A\boldsymbol{x_i} = \boldsymbol{b_i}(i = 1, 2, \cdots, m)$ を, ガウス法を用いて解く. すなわち, $n \times m$ 行列 $B$ を $B = [\boldsymbol{b_1}, \boldsymbol{b_2}, \cdots, \boldsymbol{b_m}]$ と定義した時, $[\boldsymbol{x_1}, \boldsymbol{x_2}, \cdots, \boldsymbol{x_m}] = A^{-1}B$ を求める.

(2) **使用法**

倍精度サブルーチン:

CALL DBGMSM (AB, LNA, N, M, IPVT, IERR)

単精度サブルーチン:

CALL RBGMSM (AB, LNA, N, M, IPVT, IERR)

(3) **引 数**

D:倍精度実数型　Z:倍精度複素数型　I: { 32 ビット整数版では INTEGER(4) }
R:単精度実数型　C:単精度複素数型　　 { 64 ビット整数版では INTEGER(8) }

| 項番 | 引数名 | 型 | 大きさ | 入出力 | 内　容 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | AB | {D R} | 内容参照 | 入 力 | 係数行列 $A$ と右辺ベクトル $\boldsymbol{b_i}$ からなる行列 (実行列, 2 次元配列型) $[A, \boldsymbol{b_1}, \boldsymbol{b_2}, \cdots, \boldsymbol{b_m}]$ **大きさ:** ((LNA, (N + M))) |
| | | | | 出 力 | 係数行列 $A$ の分解行列 $A'$ と解ベクトル $\boldsymbol{x_i}$ からなる行列 (実行列, 2 次元配列型) $[A', \boldsymbol{x_1}, \boldsymbol{x_2}, \cdots, \boldsymbol{x_m}]$ (注意事項 (a), (b) 参照) |
| 2 | LNA | I | 1 | 入 力 | 配列 AB の整合寸法 |
| 3 | N | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の次数 |
| 4 | M | I | 1 | 入 力 | 右辺ベクトルの数 $m$ |
| 5 | IPVT | I | N | 出 力 | ピボッティング情報 IPVT(i) : i 段目の処理において行 i と交換した行の番号 (注意事項 (a) 参照) |
| 6 | IERR | I | 1 | 出 力 | エラーインディケータ |

(4) **制限条件**

(a) $0 < \mathrm{N} \leq \mathrm{LNA}$

(b) $0 < \mathrm{M}$

(5) **エラーインディケータ**

| IERR の値 | 意　　　　味 | 処　理　内　容 |
|---|---|---|
| 0 | 正常終了. | |
| 1000 | N = 1 であった. | AB(1, N+i) ← AB(1, N+i)/AB(1, 1) ($i = 1, 2, \cdots, $M) とする. |
| 2100 | 係数行列 A の LU 分解の処理において, 対角要素が 0 に近いものがあった. 分解行列を使って求解もしくは逆行列を計算する場合, 精度の良い結果が得られない場合がある. | 処理を続ける. |
| 3000 | 制限条件 (a) を満足しなかった. | 処理を打ち切る. |
| 3010 | 制限条件 (b) を満足しなかった. | |
| $4000 + i$ | 係数行列 $A$ の LU 分解の $i$ 段目の処理において, ピボットが 0.0 となった.<br>$A$ は特異である. | |

(6) **注意事項**

(a) このサブルーチンでは, 係数行列 $A$ の LU 分解時に, 部分軸選択 (partial pivoting) が行われている. 第 i 段目のピボット行が第 j 行 (i ≤ j) となった場合, IPVT(i) に j が格納される. また, このとき, 行列 $A$ の第 i 行と第 j 行の対応する列要素のうち, 第 1 列から第 n 列までの要素が実際に交換される.

(b) 配列 AB の下三角部分に単位下三角行列 $L$ が符号をかえて, 上三角部分に上三角行列 $U$ が格納される. ただし, $L$ の対角成分は常に 1.0 であるので, 配列 AB には格納されない. また, $U$ の対角成分はその逆数が格納される.

図 2−1 行列 $L$ と行列 $U$ の格納状態

行列 $L$ 行列 $U$

$$
\begin{bmatrix} 1.0 & 0.0 & 0.0 & \cdots & 0.0 \\ l_{2,1} & 1.0 & 0.0 & \cdots & 0.0 \\ l_{3,1} & l_{3,2} & 1.0 & \cdots & 0.0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ l_{5,1} & l_{5,2} & l_{5,3} & \cdots & 1.0 \end{bmatrix}
\quad
\begin{bmatrix} u_{1,1} & u_{1,2} & u_{1,3} & \cdots & u_{1,5} \\ 0.0 & u_{2,2} & u_{2,3} & \cdots & u_{2,5} \\ 0.0 & 0.0 & u_{3,3} & \cdots & u_{3,5} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0.0 & 0.0 & 0.0 & \cdots & u_{5,5} \end{bmatrix}
$$

$$\Downarrow$$

配列AB(LNA, K)の格納状態

$$
\text{LNA}\;\left\updownarrow\;
\begin{array}{|ccccc|c}
\hline
1/u_{1,1} & u_{1,2} & u_{1,3} & \cdots & u_{1,5} & \\
-l_{1,2} & 1/u_{2,2} & u_{2,3} & \cdots & u_{2,5} & \\
-l_{1,3} & -l_{2,3} & 1/u_{3,3} & \cdots & u_{3,5} & \text{N} \\
\vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \\
-l_{1,5} & -l_{2,5} & -l_{3,5} & \cdots & 1/u_{5,5} & \\
\hline
\multicolumn{5}{c}{\longleftarrow - - - - - - - - \text{N} - - - - - - - - \longrightarrow} & \\
\multicolumn{6}{c}{\longleftarrow - - - - - - - - - - - \text{K} - - - - - - - - - - - \longrightarrow}
\end{array}\right.
$$

**備 考**
a. LNA $\geq$ N, N+M $\leq$ K を満たさなければならない.

## (7) 使用例

(a) 問 題

$$
\begin{bmatrix} 2 & 4 & -1 & 6 \\ -1 & -5 & 4 & 2 \\ 1 & 2 & 3 & 1 \\ 3 & 5 & -1 & -3 \end{bmatrix}
\begin{bmatrix} x_{1,1} & x_{1,2} \\ x_{2,1} & x_{2,2} \\ x_{3,1} & x_{3,2} \\ x_{4,1} & x_{4,2} \end{bmatrix}
=
\begin{bmatrix} 36 & 11 \\ 15 & 0 \\ 22 & 7 \\ -6 & 4 \end{bmatrix}
$$

を解く.

(b) 入力データ

係数行列 $A$ と定数ベクトル$\boldsymbol{b_1}$, $\boldsymbol{b_2}$を格納した配列 AB, LNA=11, N=4, M=2

(c) 主プログラム

```
      PROGRAM BBGMSM
! *** EXAMPLE OF DBGMSM ***
      IMPLICIT REAL(8) (A-H,O-Z)
      PARAMETER (LNA = 11)
      PARAMETER (LMA = 5)
      DIMENSION AB(LNA,LNA+LMA),IPVT(LNA)
!
      READ (5,*) N
      READ (5,*) M
      WRITE (6,1000) N, M
      DO 10 I = 1, N
         READ (5,*) (AB(I,J),J=1,N)
         WRITE (6,1100) (AB(I,J),J=1,N)
   10 CONTINUE
      WRITE (6,1200)
      DO 20 I = 1, N
         READ (5,*) (AB(I,N+J),J=1,M)
         WRITE (6,1100) (AB(I,N+J),J=1,M)
   20 CONTINUE
      WRITE (6,1300)
      CALL DBGMSM (AB,LNA,N,M,IPVT,IERR)
      WRITE (6,1400) 'DBGMSM',IERR
      IF (IERR .GE. 3000) STOP
      WRITE (6,1600)
      DO 30 I = 1, N
         WRITE (6,1100) (AB(I,N+J),J=1,M)
   30 CONTINUE
      STOP
!
 1000 FORMAT(' ',/,/,&
             ' ***  DBGMSM  ***',/,&
             2X,'**  INPUT  **',/,&
             6X,'N =',I3,/,&
             6X,'M =',I3,/,&
             6X,'COEFFICIENT MATRIX')
 1100 FORMAT(7X,10(F11.4))
 1200 FORMAT(6X,'CONSTANT VECTORS')
 1300 FORMAT(2X,'**  OUTPUT  **')
```

```
 1400 FORMAT(6X,'IERR (',A6,') =',I5)
 1600 FORMAT(6X,'SOLUTION')
      END
```

(d) 出力結果

```
***  DBGMSM  ***
 **  INPUT  **
     N =  4
     M =  2
     COEFFICIENT MATRIX
           2.0000     4.0000    -1.0000     6.0000
          -1.0000    -5.0000     4.0000     2.0000
           1.0000     2.0000     3.0000     1.0000
           3.0000     5.0000    -1.0000    -3.0000
     CONSTANT VECTORS
          36.0000    11.0000
          15.0000     0.0000
          22.0000     7.0000
          -6.0000     4.0000
 **  OUTPUT  **
     IERR (DBGMSM) =    0
     SOLUTION
           1.0000     1.0000
           2.0000     1.0000
           4.0000     1.0000
           5.0000     1.0000
```

### 2.2.2 DBGMSL, RBGMSL 連立 1 次方程式 (実行列)

(1) **機 能**

実行列 $A$(2 次元配列型) を係数行列とする連立 1 次方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ を, ガウス法またはクラウト法を用いて解く.

(2) **使用法**

倍精度サブルーチン:

CALL DBGMSL (A, LNA, N, B, IPVT, IERR)

単精度サブルーチン:

CALL RBGMSL (A, LNA, N, B, IPVT, IERR)

(3) **引 数**

D:倍精度実数型　Z:倍精度複素数型
R:単精度実数型　C:単精度複素数型
I: 32 ビット整数版では INTEGER(4), 64 ビット整数版では INTEGER(8)

| 項番 | 引数名 | 型 | 大きさ | 入出力 | 内 容 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | A | {D, R} | LNA, N | 入 力 | 係数行列 $A$(実行列, 2 次元配列型) |
| | | | | 出 力 | $A = LU$ と分解したときの上三角行列 $U$, および下三角行列 $L$(注意事項 (b), (c) 参照) |
| 2 | LNA | I | 1 | 入 力 | 配列 A の整合寸法 |
| 3 | N | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の次数 |
| 4 | B | {D, R} | N | 入 力 | 定数ベクトル$\boldsymbol{b}$ |
| | | | | 出 力 | 解ベクトル$\boldsymbol{x}$ |
| 5 | IPVT | I | N | 出 力 | ピボッティング情報 IPVT(i) :<br>i 段目の処理において行 i と交換した行の番号 (注意事項 (b) 参照) |
| 6 | IERR | I | 1 | 出 力 | エラーインディケータ |

(4) **制限条件**

(a) $0 < \mathrm{N} \leq \mathrm{LNA}$

(5) **エラーインディケータ**

| IERR の値 | 意　　　　味 | 処　理　内　容 |
|---|---|---|
| 0 | 正常終了. | |
| 1000 | N = 1 であった. | B(1) ← B(1)/A(1, 1) とする. |
| 2100 | 係数行列 A の LU 分解の処理において, 対角要素が 0 に近いものがあった. 分解行列を使って求解もしくは逆行列を計算する場合, 精度の良い結果が得られない場合がある. | 処理を続ける. |
| 3000 | 制限条件 (a) を満足しなかった. | 処理を打ち切る. |
| $4000 + i$ | 係数行列 $A$ の LU 分解の $i$ 段目の処理において, ピボットが 0.0 となった.<br>$A$ は特異である. | |

(6) **注意事項**

(a) 定数ベクトル$\boldsymbol{b}$のみが異なる複数の連立 1 次方程式を解く場合には, 直接サブルーチン 2.2.1 $\left\{\begin{matrix}\text{DBGMSM}\\\text{RBGMSM}\end{matrix}\right\}$を用いて計算する方が効率よく解が求まる. ただし, 右辺ベクトル$\boldsymbol{b}$のすべてが前もって分からない場合など, 2.2.1 $\left\{\begin{matrix}\text{DBGMSM}\\\text{RBGMSM}\end{matrix}\right\}$を利用できない場合には, このサブルーチンを一度使用した後, 続けてサブルーチン 2.2.5 $\left\{\begin{matrix}\text{DBGMLS}\\\text{RBGMLS}\end{matrix}\right\}$を配列 B の内容のみを変えて使用すればよい. このようにすれば, 行列 $A$ の LU 分解が一度だけしか行われないため, 効率よく解が求まる.

(b) このサブルーチンでは, 係数行列 $A$ の LU 分解時に, 部分軸選択 (partial pivoting) が行われている. 第 i 段目のピボット行が第 j 行 (i ≤ j) となった場合, IPVT(i) に j が格納される. また, このとき, 行列 $A$ の第 i 行と第 j 行の対応する列要素のうち, 第 1 列から第 n 列までの要素が実際に交換される.

(c) 配列 A の下三角部分に単位下三角行列 $L$ が符号をかえて, 上三角部分に上三角行列 $U$ が格納される. ただし, $L$ の対角成分は常に 1.0 であるので, 配列 A には格納されない. また, $U$ の対角成分はその逆数が格納される.

図 2−2　行列 $L$ と行列 $U$ の格納状態

$$
\begin{array}{cc}
\text{行列 } L & \text{行列 } U \\
\begin{bmatrix}
1.0 & 0.0 & 0.0 & \cdots & 0.0 \\
l_{2,1} & 1.0 & 0.0 & \cdots & 0.0 \\
l_{3,1} & l_{3,2} & 1.0 & \cdots & 0.0 \\
\vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
l_{5,1} & l_{5,2} & l_{5,3} & \cdots & 1.0
\end{bmatrix}
&
\begin{bmatrix}
u_{1,1} & u_{1,2} & u_{1,3} & \cdots & u_{1,5} \\
0.0 & u_{2,2} & u_{2,3} & \cdots & u_{2,5} \\
0.0 & 0.0 & u_{3,3} & \cdots & u_{3,5} \\
\vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
0.0 & 0.0 & 0.0 & \cdots & u_{5,5}
\end{bmatrix}
\end{array}
$$

$$\Downarrow$$

配列A(LNA, K)の格納状態

$$
\text{LNA}\ \updownarrow
\begin{array}{|ccccc|c}
\hline
1/u_{1,1} & u_{1,2} & u_{1,3} & \cdots & u_{1,5} & \\
-l_{1,2} & 1/u_{2,2} & u_{2,3} & \cdots & u_{2,5} & \\
-l_{1,3} & -l_{2,3} & 1/u_{3,3} & \cdots & u_{3,5} & \\
\vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \\
-l_{1,5} & -l_{2,5} & -l_{3,5} & \cdots & 1/u_{5,5} & \\
\hline
\multicolumn{5}{c}{\longleftarrow\text{ N }\longrightarrow} & \\
\multicolumn{6}{c}{\longleftarrow\text{ K }\longrightarrow} \\
\end{array}
\ \updownarrow\ \text{N}
$$

**備　考**

a.　LNA $\geq$ N, N $\leq$ K を満たさなければならない.

(7) **使用例**

(a) 問 題

$$
\begin{bmatrix}
2 & 4 & -1 & 6 \\
-1 & -5 & 4 & 2 \\
1 & 2 & 3 & 1 \\
3 & 5 & -1 & -3
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix}
x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4
\end{bmatrix}
=
\begin{bmatrix}
36 \\ 15 \\ 22 \\ -6
\end{bmatrix}
\text{ を解く.}
$$

(b) 入力データ

係数行列 $A$, LNA=11, N=4, 定数ベクトル$\boldsymbol{b}$

(c) 主プログラム

```
      PROGRAM BBGMSL
! *** EXAMPLE OF DBGMSL ***
      IMPLICIT REAL(8) (A-H,O-Z)
      PARAMETER (LNA = 11)
      DIMENSION A(LNA,LNA),B(LNA),IPVT(LNA)
!
      READ (5,*) N
      WRITE (6,1000) N
      DO 10 I = 1, N
         READ (5,*) (A(I,J),J=1,N)
         WRITE (6,1100) (A(I,J),J=1,N)
   10 CONTINUE
      READ (5,*) (B(I),I=1,N)
      WRITE (6,1200) (B(I),I=1,N)
      WRITE (6,1300)
      CALL DBGMSL (A,LNA,N,B,IPVT,IERR)
      WRITE (6,1400) 'DBGMSL',IERR
      IF (IERR .GE. 3000) STOP
      WRITE (6,1600) (I,B(I),I=1,N)
      STOP
!
 1000 FORMAT(' ',/,/,&
             ' ***  DBGMSL  ***',/,&
             2X,'**  INPUT  **',/,&
             6X,'N =',I3,/,&
             6X,'COEFFICIENT MATRIX')
 1100 FORMAT(7X,10(G11.4))
 1200 FORMAT(6X,'CONSTANT VECTOR',/,(7X,F10.4))
 1300 FORMAT(2X,'**  OUTPUT  **')
 1400 FORMAT(6X,'IERR (',A6,') =',I5)
 1600 FORMAT(6X,'SOLUTION',/,(8X,'X(',I2,') =',D18.10))
      END
```

(d) 出力結果

```
***  DBGMSL  ***
 **  INPUT  **
     N =  4
     COEFFICIENT MATRIX
        2.000      4.000     -1.000      6.000
```

```
        -1.000      -5.000       4.000       2.000
         1.000       2.000       3.000       1.000
         3.000       5.000      -1.000      -3.000
      CONSTANT VECTOR
          36.0000
          15.0000
          22.0000
          -6.0000
**  OUTPUT  **
      IERR (DBGMSL) =    0
      SOLUTION
        X( 1) =  0.1000000000D+01
        X( 2) =  0.2000000000D+01
        X( 3) =  0.4000000000D+01
        X( 4) =  0.5000000000D+01
```

## 2.2.3 DBGMLU, RBGMLU 実行列の LU 分解

(1) **機 能**

実行列 $A$(2 次元配列型) をガウス法またはクラウト法を用いて LU 分解する.

(2) **使用法**

倍精度サブルーチン:

CALL DBGMLU (A, LNA, N, IPVT, IERR)

単精度サブルーチン:

CALL RBGMLU (A, LNA, N, IPVT, IERR)

(3) **引 数**

D:倍精度実数型　Z:倍精度複素数型
R:単精度実数型　C:単精度複素数型

I: $\left\{\begin{array}{l}\text{32 ビット整数版では INTEGER(4)} \\ \text{64 ビット整数版では INTEGER(8)}\end{array}\right\}$

| 項番 | 引数名 | 型 | 大きさ | 入出力 | 内　容 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | A | $\left\{\begin{array}{c}\text{D}\\\text{R}\end{array}\right\}$ | LNA, N | 入 力 | 実行列 $A$(2 次元配列型) |
| | | | | 出 力 | $A = LU$ と分解されたときの上三角行列 $U$ および下三角行列 $L$(注意事項 (a), (b) 参照) |
| 2 | LNA | I | 1 | 入 力 | 配列 A の整合寸法 |
| 3 | N | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の次数 |
| 4 | IPVT | I | N | 出 力 | ピボッティング情報 IPVT(i) :<br>i 段目の処理において行 i と交換した行の番号 (注意事項 (b) 参照) |
| 5 | IERR | I | 1 | 出 力 | エラーインディケータ |

(4) **制限条件**

(a) $0 < \text{N} \leq \text{LNA}$

(5) **エラーインディケータ**

| IERR の値 | 意　味 | 処 理 内 容 |
|---|---|---|
| 0 | 正常終了. | |
| 1000 | N = 1 であった. | 配列 A の内容は変更されない. |
| 2100 | 係数行列 A の LU 分解の処理において, 対角要素が 0 に近いものがあった. 分解行列を使って求解もしくは逆行列を計算する場合, 精度の良い結果が得られない場合がある. | 処理を続ける. |
| 3000 | 制限条件 (a) を満足しなかった. | 処理を打ち切る. |
| $4000 + i$ | $i$ 段目の処理において, ピボットが 0.0 となった.<br>$A$ は特異である. | |

(6) **注意事項**

(a) 配列 A には, 下三角部分に単位下三角行列 $L$ が符号をかえて, 上三角部分に上三角行列 $U$ が格納される. ただし, 行列 $L$ の対角成分は常に 1.0 であるので, 配列 A には格納されない. また $U$ の対角成分は, その逆数が格納される (2.2.2 図 2−2 参照).

(b) このサブルーチンにおいては, 部分軸選択 (partial pivoting) が行われている. このときの情報は後続のサブルーチンで使用されるため, 配列 IPVT に格納される. 第 i 段目のピボット行が第 j 行 ($i \leq j$) となった場合, IPVT(i) に j が格納される. また, このとき行列 $A$ の第 i 行と第 j 行の対応する列要素のうち, 第 1 列から第 n 列までの要素が実際に交換される.

### 2.2.4 DBGMLC, RBGMLC<br>実行列の LU 分解と条件数

(1) **機 能**

実行列 $A$(2 次元配列型) をガウス法またはクラウト法を用いて LU 分解し, 条件数を求める.

(2) **使用法**

倍精度サブルーチン:

CALL DBGMLC (A, LNA, N, IPVT, COND, W1, IERR)

単精度サブルーチン:

CALL RBGMLC (A, LNA, N, IPVT, COND, W1, IERR)

(3) **引 数**

D:倍精度実数型　Z:倍精度複素数型　I: {32 ビット整数版では INTEGER(4), 64 ビット整数版では INTEGER(8)}
R:単精度実数型　C:単精度複素数型

| 項番 | 引数名 | 型 | 大きさ | 入出力 | 内　　容 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | A | {D, R} | LNA, N | 入 力 | 実行列 $A$(2 次元配列型) |
| | | | | 出 力 | $A = LU$ と分解したときの上三角行列 $U$ および下三角行列 $L$ (注意事項 (a), (b) 参照) |
| 2 | LNA | I | 1 | 入 力 | 配列 A の整合寸法 |
| 3 | N | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の次数 |
| 4 | IPVT | I | N | 出 力 | ピボッティング情報 IPVT(i) :<br>i 段目の処理において行 i と交換した行の番号 (注意事項 (b) 参照) |
| 5 | COND | {D, R} | 1 | 出 力 | 条件数の逆数 |
| 6 | W1 | {D, R} | N | ワーク | 作業領域 |
| 7 | IERR | I | 1 | 出 力 | エラーインディケータ |

(4) **制限条件**

(a) $0 < \mathrm{N} \leq \mathrm{LNA}$

(5) **エラーインディケータ**

| IERR の値 | 意　　　　　味 | 処　理　内　容 |
|---|---|---|
| 0 | 正常終了. | |
| 1000 | N = 1 であった. | 配列 A の内容は変更されない.<br>COND ← 1.0 とする. |
| 2100 | 係数行列 A の LU 分解の処理において, 対角要素が 0 に近いものがあった. 分解行列を使って求解もしくは逆行列を計算する場合, 精度の良い結果が得られない場合がある. | 処理を続ける. |
| 3000 | 制限条件 (a) を満足しなかった. | 処理を打ち切る. |
| $4000+i$ | $i$ 段目の処理において, ピボットが 0.0 となった.<br>$A$ は特異である. | 処理を打ち切る.<br>条件数は求められない. |

(6) **注意事項**

(a) 配列 A には, 下三角部分に単位下三角行列 $L$ が符号をかえて, 上三角部分に上三角行列 $U$ が格納される. ただし, 行列 $L$ の対角成分は常に 1.0 であるので, 配列 A には格納されない. また $U$ の対角成分はその逆数が格納される (2.2.2 図 2−2 参照).

(b) このサブルーチンにおいては, 部分軸選択 (partial pivoting) が行われている. このときの情報は後続のサブルーチンで使用されるため, 配列 IPVT に格納される. 第 i 段目のピボット行が第 j 行 (i ≤ j) となった場合, IPVT(i) に j が格納される. また, このとき, 行列 $A$ の第 i 行と第 j 行の対応する列要素のうち, 第 1 列から第 n 列までの要素が実際に交換される.

(c) 条件数は $\|A\| \cdot \|A^{-1}\|$ で定義されるが, このサブルーチンで求められるのはその概算値である.

## 2.2.5 DBGMLS, RBGMLS 連立 1 次方程式 (LU 分解後の実行列)

(1) **機 能**

ガウス法またはクラウト法で LU 分解された実行列 $A$(2 次元配列型) を係数行列とする連立 1 次方程式 $LU\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ を解く.

(2) **使用法**

倍精度サブルーチン:

CALL DBGMLS (A, LNA, N, B, IPVT, IERR)

単精度サブルーチン:

CALL RBGMLS (A, LNA, N, B, IPVT, IERR)

(3) **引 数**

D:倍精度実数型 Z:倍精度複素数型
R:単精度実数型 C:単精度複素数型
I: $\left\{\begin{array}{l}\text{32 ビット整数版では INTEGER(4)}\\\text{64 ビット整数版では INTEGER(8)}\end{array}\right\}$

| 項番 | 引数名 | 型 | 大きさ | 入出力 | 内 容 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | A | $\left\{\begin{matrix}\text{D}\\\text{R}\end{matrix}\right\}$ | LNA, N | 入 力 | LU 分解後の係数行列 $A$(実行列, 2 次元配列型) (注意事項 (a), (b) 参照) |
| 2 | LNA | I | 1 | 入 力 | 配列 A の整合寸法 |
| 3 | N | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の次数 |
| 4 | B | $\left\{\begin{matrix}\text{D}\\\text{R}\end{matrix}\right\}$ | N | 入 力 | 定数ベクトル$\boldsymbol{b}$ |
| | | | | 出 力 | 解ベクトル$\boldsymbol{x}$ |
| 5 | IPVT | I | N | 入 力 | ピボッティング情報 IPVT(i) :<br>LU 分解の i 段目の処理において行 i と交換した行の番号 (注意事項 (c) 参照) |
| 6 | IERR | I | 1 | 出 力 | エラーインディケータ |

(4) **制限条件**

(a) $0 < \text{N} \leq \text{LNA}$

(5) **エラーインディケータ**

| IERR の値 | 意 味 | 処 理 内 容 |
|---|---|---|
| 0 | 正常終了. | |
| 1000 | $\text{N} = 1$ であった. | $\text{B}(1) \leftarrow \text{B}(1)/\text{A}(1,1)$ とする. |
| 3000 | 制限条件 (a) を満足しなかった. | 処理を打ち切る. |

(6) **注意事項**

(a) このサブルーチンを使用するには, 係数行列 $A$ を LU 分解しておく必要がある. 通常はサブルーチン 2.2.3 $\left\{\begin{matrix}\text{DBGMLU}\\\text{RBGMLU}\end{matrix}\right\}$ を使用して分解するが, 条件数も求めたい場合は 2.2.4 $\left\{\begin{matrix}\text{DBGMLC}\\\text{RBGMLC}\end{matrix}\right\}$ を使用する. また, 2.2.2 $\left\{\begin{matrix}\text{DBGMSL}\\\text{RBGMSL}\end{matrix}\right\}$ を使用して, 同一の係数行列 $A$ を持つ連立 1 次方程式をすでに解いている場合は, その出力として得られる LU 分解を利用することもできる. 定数ベクトル $b$ のみが異なる複数の連立 1 次方程式を解く場合には, 直接サブルーチン 2.2.6 $\left\{\begin{matrix}\text{DBGMMS}\\\text{RBGMMS}\end{matrix}\right\}$ を用いて計算する方が効率良く解が求まる.

(b) 配列 A には, 下三角部分に単位下三角行列 $L$ が符号をかえて, 上三角部分に上三角行列 $U$ が格納されていなければならない. ただし, 行列 $L$ の対角成分は常に 1.0 であるので, 配列 A には格納されていなくてよい. また, $U$ の対角成分はその逆数が格納されていなければならない (2.2.2 図 2−2 参照).

(c) IPVT には, LU 分解時に行った部分軸選択 (partial pivoting) についての情報が格納されていなければならない. この情報は行列 $A$ の LU 分解を行う 2.2.3 $\left\{\begin{matrix}\text{DBGMLU}\\\text{RBGMLU}\end{matrix}\right\}$, 2.2.4 $\left\{\begin{matrix}\text{DBGMLC}\\\text{RBGMLC}\end{matrix}\right\}$, 2.2.2 $\left\{\begin{matrix}\text{DBGMSL}\\\text{RBGMSL}\end{matrix}\right\}$ によって与えられる.

## 2.2.6 DBGMMS, RBGMMS
## 多重右辺連立 1 次方程式 (LU 分解後の実行列)

(1) **機 能**

LU 分解された実行列 $A$(2 次元配列型) を係数行列とする連立 1 次方程式 $LU\boldsymbol{x_i} = \boldsymbol{b_i}(i = 1, 2, \cdots, m)$ を解く. すなわち, $n \times m$ 行列 $B$ を $B = [\boldsymbol{b_1}, \boldsymbol{b_2}, \cdots, \boldsymbol{b_m}]$ と定義した時, $[\boldsymbol{x_1}, \boldsymbol{x_2}, \cdots, \boldsymbol{x_m}] = A^{-1}B$ を求める.

(2) **使用法**

倍精度サブルーチン:

CALL DBGMMS (A, LNA, N, B, LNB, M, IPVT, IERR)

単精度サブルーチン:

CALL RBGMMS (A, LNA, N, B, LNB, M, IPVT, IERR)

(3) **引 数**

D:倍精度実数型　Z:倍精度複素数型
R:単精度実数型　C:単精度複素数型
I: $\left\{\begin{array}{l}\text{32 ビット整数版では INTEGER(4)}\\\text{64 ビット整数版では INTEGER(8)}\end{array}\right\}$

| 項番 | 引数名 | 型 | 大きさ | 入出力 | 内　容 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | A | $\begin{Bmatrix}\mathrm{D}\\\mathrm{R}\end{Bmatrix}$ | LNA, N | 入 力 | LU 分解後の係数行列 $A$(実行列, 2 次元配列型) (注意事項 (a), (b) 参照) |
| 2 | LNA | I | 1 | 入 力 | 配列 A の整合寸法 |
| 3 | N | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の次数 |
| 4 | B | $\begin{Bmatrix}\mathrm{D}\\\mathrm{R}\end{Bmatrix}$ | LNB, M | 入 力 | 定数ベクトル$\boldsymbol{b_i}$からなる行列 $[\boldsymbol{b_1}, \boldsymbol{b_2}, \cdots, \boldsymbol{b_m}]$ |
| | | | | 出 力 | 解ベクトル$\boldsymbol{x_i}$からなる行列 $[\boldsymbol{x_1}, \boldsymbol{x_2}, \cdots, \boldsymbol{x_m}]$ |
| 5 | LNB | I | 1 | 入 力 | 配列 B の整合寸法 |
| 6 | M | I | 1 | 入 力 | 右辺ベクトルの数 |
| 7 | IPVT | I | N | 入 力 | ピボッティング情報 IPVT(i)：LU 分解の i 段目の処理において行 i と交換した行の番号 (注意事項 (c) 参照) |
| 8 | IERR | I | 1 | 出 力 | エラーインディケータ |

(4) **制限条件**

(a) $0 < \mathrm{N} \leq \mathrm{LNA}, \mathrm{LNB}$

(b) $0 < \mathrm{M}$

(c) $0 < \mathrm{IPVT}(i) \leq \mathrm{N}\ \ (i = 1, \ldots, \mathrm{N})$

(5) **エラーインディケータ**

| IERR の値 | 意　　　　　味 | 処　理　内　容 |
|---|---|---|
| 0 | 正常終了 | |
| 1000 | N = 1 であった. | B(1, i) ← B(1, i)/A(1, 1) ($i = 1, 2, \cdots$, M) とする. |
| 3000 | 制限条件 (a) を満足しなかった. | 処理を打ち切る. |
| 3010 | 制限条件 (b) を満足しなかった. | |
| 3020 | 制限条件 (c) を満足しなかった. | |

(6) **注意事項**

(a) このサブルーチンを使用するには, 係数行列 $A$ を LU 分解しておく必要がある. 通常はサブルーチン 2.2.3 $\left\{\begin{matrix}\text{DBGMLU}\\\text{RBGMLU}\end{matrix}\right\}$ を使用して分解するが, 条件数も求めたい場合は 2.2.4 $\left\{\begin{matrix}\text{DBGMLC}\\\text{RBGMLC}\end{matrix}\right\}$ を使用する. また, 2.2.2 $\left\{\begin{matrix}\text{DBGMSL}\\\text{RBGMSL}\end{matrix}\right\}$ を使用して, 同一の係数行列 $A$ を持つ連立 1 次方程式をすでに解いている場合は, その出力として得られる LU 分解を利用することもできる.

(b) 配列 A には, 下三角部分に単位下三角行列 $L$ が符号をかえて, 上三角部分に上三角行列 $U$ が格納されていなければならない. ただし, 行列 $L$ の対角成分は常に 1.0 であるので, 配列 A には格納されていなくてよい. また, $U$ の対角成分はその逆数が格納されていなければならない.

(c) IPVT には, LU 分解時に行った部分軸選択 (partial pivoting) についての情報が格納されていなければならない. この情報は行列 $A$ の LU 分解を行う 2.2.3 $\left\{\begin{matrix}\text{DBGMLU}\\\text{RBGMLU}\end{matrix}\right\}$, 2.2.4 $\left\{\begin{matrix}\text{DBGMLC}\\\text{RBGMLC}\end{matrix}\right\}$,2.2.2 $\left\{\begin{matrix}\text{DBGMSL}\\\text{RBGMSL}\end{matrix}\right\}$ によって与えられる.

(7) **使用例**

(a) 問 題

$$\begin{bmatrix} 2 & 4 & -1 & 6 \\ -1 & -5 & 4 & 2 \\ 1 & 2 & 3 & 1 \\ 3 & 5 & -1 & -3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_{1,1} & x_{1,2} \\ x_{2,1} & x_{2,2} \\ x_{3,1} & x_{3,2} \\ x_{4,1} & x_{4,2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 36 & 11 \\ 15 & 0 \\ 22 & 7 \\ -6 & 4 \end{bmatrix}$$ を解く.

(b) 入力データ

係数行列 $A$, LNA=10, N=4, 定数ベクトル$\boldsymbol{b}$からなる行列 $B$, LNB=10, M=2

(c) 主プログラム

```
      PROGRAM BBGMSM
! *** EXAMPLE OF DBGMMS ***
      IMPLICIT NONE
      INTEGER LNA,LNB,N,M,I,J,IERR
      PARAMETER (LNA=10,LNB=10,N=4,M=2)
      INTEGER IPVT(LNA)
      REAL(8) A(LNA,N),B(LNB,M)
      DATA ((A(I,J),J=1,N),I=1,N)/&
           2.0D0,  4.0D0, -1.0D0,  6.0D0,&
          -1.0D0, -5.0D0,  4.0D0,  2.0D0,&
           1.0D0,  2.0D0,  3.0D0,  1.0D0,&
           3.0D0,  5.0D0, -1.0D0, -3.0D0/
      DATA ((B(I,J),J=1,M),I=1,N)/&
           36.0D0, 11.0D0,&
           15.0D0,  0.0D0,&
           22.0D0,  7.0D0,&
           -6.0D0,  4.0D0/
!
      WRITE (6,1000) N, M
      DO 10 I = 1, N
         WRITE (6,1100) (A(I,J),J=1,N)
   10 CONTINUE
```

```
      WRITE (6,1200)
      DO 20 I = 1, N
         WRITE (6,1100) (B(I,J),J=1,M)
   20 CONTINUE
      WRITE (6,1300)
!
      CALL DBGMLU (A,LNA,N,IPVT,IERR)
      IF (IERR .GE. 3000) STOP
      CALL DBGMMS (A,LNA,N,B,LNB,M,IPVT,IERR)
      IF (IERR .GE. 3000) STOP
!
      WRITE (6,1400) IERR
      WRITE (6,1500)
      DO 30 I = 1, N
         WRITE (6,1100) (B(I,J),J=1,M)
   30 CONTINUE
      STOP
!
 1000 FORMAT(1X                             ,/,&
             1X, '***  DBGMMS  ***'         ,/,&
             1X, ' **  INPUT  **'          ,/,/,&
             1X, '     N =',I3              ,/,&
             1X, '     M =',I3              ,/,&
             1X,/,&
             1X, '    COEFFICIENT MATRIX'   )
 1100 FORMAT(1X, 6X,10(F11.4)               )
 1200 FORMAT(1X,/,&
             1X, '    CONSTANT VECTORS'     )
 1300 FORMAT(1X,/,&
             1X, ' **  OUTPUT  **'          ,/)
 1400 FORMAT(1X, '    IERR  =',I5           )
 1500 FORMAT(1X,/,&
             1X, '    SOLUTION'             )
      END
```

(d) 出力結果

```
***  DBGMMS  ***
 **  INPUT  **

     N =  4
     M =  2

    COEFFICIENT MATRIX
           2.0000     4.0000    -1.0000     6.0000
          -1.0000    -5.0000     4.0000     2.0000
           1.0000     2.0000     3.0000     1.0000
           3.0000     5.0000    -1.0000    -3.0000

    CONSTANT VECTORS
          36.0000    11.0000
          15.0000     0.0000
          22.0000     7.0000
          -6.0000     4.0000

 **  OUTPUT  **

    IERR  =    0

    SOLUTION
           1.0000     1.0000
           2.0000     1.0000
           4.0000     1.0000
           5.0000     1.0000
```

## 2.2.7 DBGMDI, RBGMDI
## 実行列の行列式と逆行列

(1) **機 能**

ガウス法またはクラウト法で LU 分解された実行列 $A$(2 次元配列型) の行列式と逆行列を求める.

(2) **使用法**

倍精度サブルーチン:

CALL DBGMDI (A, LNA, N, IPVT, DET, ISW, W1, IERR)

単精度サブルーチン:

CALL RBGMDI (A, LNA, N, IPVT, DET, ISW, W1, IERR)

(3) **引 数**

D:倍精度実数型　Z:倍精度複素数型　I: {32 ビット整数版では INTEGER(4) / 64 ビット整数版では INTEGER(8)}
R:単精度実数型　C:単精度複素数型

| 項番 | 引数名 | 型 | 大きさ | 入出力 | 内　容 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | A | {D/R} | LNA, N | 入 力 | LU 分解後の実行列 $A$(2 次元配列型) (注意事項 (a), (b) 参照) |
| | | | | 出 力 | 行列 $A$ の逆行列 |
| 2 | LNA | I | 1 | 入 力 | 配列 A の整合寸法 |
| 3 | N | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の次数 |
| 4 | IPVT | I | N | 入 力 | ピボッティング情報 IPVT(i) :<br>LU 分解の i 段目の処理において行 i と交換した行の番号 (注意事項 (c) 参照) |
| 5 | DET | {D/R} | 2 | 出 力 | 行列 $A$ の行列式の値 (注意事項 (d) 参照) |
| 6 | ISW | I | 1 | 入 力 | 処理スイッチ<br>ISW>0:行列式の値を求める.<br>ISW=0:行列式の値と逆行列を求める.<br>ISW<0:逆行列を求める. |
| 7 | W1 | {D/R} | N | ワーク | 作業領域 |
| 8 | IERR | I | 1 | 出 力 | エラーインディケータ |

(4) **制限条件**

(a) $0 < \mathrm{N} \leq \mathrm{LNA}$

(5) **エラーインディケータ**

| IERR の値 | 意　　　　味 | 処　理　内　容 |
|---|---|---|
| 0 | 正常終了. | |
| 1000 | N = 1 であった. | DET(1) ← A(1, 1)<br>DET(2) ← 0.0<br>A(1, 1) ← 1.0/A(1, 1) とする. |
| 3000 | 制限条件 (a) を満足しなかった. | 処理を打ち切る. |

(6) **注意事項**

(a) このサブルーチンを使用するには, 係数行列 $A$ を LU 分解しておく必要がある.
分解は 2.2.2 $\begin{Bmatrix}\text{DBGMSL}\\\text{RBGMSL}\end{Bmatrix}$, 2.2.3 $\begin{Bmatrix}\text{DBGMLU}\\\text{RBGMLU}\end{Bmatrix}$, 2.2.4 $\begin{Bmatrix}\text{DBGMLC}\\\text{RBGMLC}\end{Bmatrix}$ のいずれかで行えばよい.

(b) 入力時の配列 A には, 下三角部分に $A = LU$ となる下三角行列 $L$ が上三角部分に上三角行列 $U$ が格納されていなければならない. ただし, 行列 $L$ の対角成分は常に 1.0 であるので, 配列 A には格納されていなくてよい (2.2.2 図 2−2 参照).

(c) IPVT には, LU 分解時に行った部分軸選択 (partial pivoting) についての情報が格納されていなければならない. この情報は行列 $A$ の LU 分解を行うサブルーチンによって与えられる.

(d) 行列式の値は次の式によって与えられる.
$det(A) = \mathrm{DET}(1) \times 10^{\mathrm{DET}(2)}$
この時, $1.0 \leq |\mathrm{DET}(1)| < 10.0$ となるようにスケーリングされている.

(e) **行列の次数が 100 以下など十分に小さい場合や, 逆行列そのものが必要である場合を除いて, 逆行列を計算すべきではない.** 数値計算では多くの場合, 逆行列は, $A^{-1}\boldsymbol{b}$ や $A^{-1}B$ といった形式で現れるが, これらはそれぞれ, ベクトル $\boldsymbol{x}$ についての 連立 1 次方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$, 行列 $X$ についての多重右辺連立 1 次方程式 $AX = B$ として連立 1 次方程式を解いて計算すべきである. 数学的には, 逆行列を求めて逆行列とベクトルの積や逆行列と行列の積を計算することと前述のような連立 1 次方程式を解くことは同じであるが, 数値計算上は一般に, 逆行列による求解は計算効率も悪く, 計算精度も劣る.

### 2.2.8 DBGMLX, RBGMLX
### 連立 1 次方程式の解の改良 (実行列)

(1) **機 能**

実行列 $A$(2 次元配列型) を係数行列とする連立 1 次方程式 $A\boldsymbol{x} = b$ の解を反復法により改良する.

(2) **使用法**

倍精度サブルーチン:

CALL DBGMLX (A, LNA, N, ALU, B, X, ITOL, NIT, IPVT, W1, IERR)

単精度サブルーチン:

CALL RBGMLX (A, LNA, N, ALU, B, X, ITOL, NIT, IPVT, W1, IERR)

(3) **引 数**

D:倍精度実数型　Z:倍精度複素数型　I: { 32 ビット整数版では INTEGER(4) / 64 ビット整数版では INTEGER(8) }
R:単精度実数型　C:単精度複素数型

| 項番 | 引数名 | 型 | 大きさ | 入出力 | 内　容 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | A | {D/R} | LNA, N | 入 力 | 係数行列 $A$(実行列, 2 次元配列型) |
| 2 | LNA | I | 1 | 入 力 | 配列 A, ALU の整合寸法 |
| 3 | N | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の次数 |
| 4 | ALU | {D/R} | LNA, N | 入 力 | LU 分解後の係数行列 $A$(注意事項 (a) 参照) |
| 5 | B | {D/R} | N | 入 力 | 定数ベクトル $\boldsymbol{b}$ |
| 6 | X | {D/R} | N | 入 力 | 近似解 $\boldsymbol{x}$ |
| | | | | 出 力 | 反復改良された解 $\boldsymbol{x}$ |
| 7 | ITOL | I | 1 | 入 力 | 改良したい桁数 (注意事項 (b) 参照) |
| | | | | 出 力 | 改良された桁数の近似値 (注意事項 (c) 参照) |
| 8 | NIT | I | 1 | 入 力 | 最大反復回数 (注意事項 (d) 参照) |
| 9 | IPVT | I | N | 入 力 | ピボッティング情報 (注意事項 (a) 参照) |
| 10 | W1 | {D/R} | N | ワーク | 作業領域 |
| 11 | IERR | I | 1 | 出 力 | エラーインディケータ |

(4) **制限条件**

(a) $0 < \mathrm{N} \leq \mathrm{LNA}$

(5) **エラーインディケータ**

| IERR の値 | 意　　　　　味 | 処　理　内　容 |
|---|---|---|
| 0 | 正常終了. | |
| 1000 | N = 1 であった. | 解は改良されない. |
| 3000 | 制限条件 (a) を満足しなかった. | 処理を打ち切る. |
| 5000 | 最大反復回数以内で収束しなかった. | ITOL の出力値を計算し, 処理を打ち切る. |
| 6000 | 解を改良できなかった. | |

(6) **注意事項**

(a) このサブルーチンは, 2.2.2 $\left\{\begin{matrix}\text{DBGMSL}\\ \text{RBGMSL}\end{matrix}\right\}$ または 2.2.5 $\left\{\begin{matrix}\text{DBGMLS}\\ \text{RBGMLS}\end{matrix}\right\}$ によって得られた解を, さらに改良するものである. 従って, 入力として 2.2.2 $\left\{\begin{matrix}\text{DBGMSL}\\ \text{RBGMSL}\end{matrix}\right\}$, 2.2.3 $\left\{\begin{matrix}\text{DBGMLU}\\ \text{RBGMLU}\end{matrix}\right\}$ または 2.2.4 $\left\{\begin{matrix}\text{DBGMLC}\\ \text{RBGMLC}\end{matrix}\right\}$ によって分解された係数行列 $A$ とその時得られたピボッティング情報を与えなければならない.

(b) 解の改良は, 解の上位 ITOL 桁が修正されなくなるまで反復される. ただし, 以下の条件を満たす場合は, 解の修正が下位 1 ビット以下になるまで反復される.
ITOL $\leq$ 0 または ITOL $\geq -$ LOG10 $(2 \times \varepsilon)$($\varepsilon$ : 誤差判定のための単位)

(c) 反復回数以内で, 要求された桁数が収束しなかった場合, 修正されなくなった桁数の近似値が ITOL に返される.

(d) NIT の入力値が 0 以下の場合, 既定値として 40 がとられる.

(7) **使用例**

(a) 問 題

$$\begin{bmatrix} 10 & 9 & 8 & 7 & 6 & 5 & 4 & 3 & 2 & 1 \\ 9 & 9 & 8 & 7 & 6 & 5 & 4 & 3 & 2 & 1 \\ 8 & 8 & 8 & 7 & 6 & 5 & 4 & 3 & 2 & 1 \\ 7 & 7 & 7 & 7 & 6 & 5 & 4 & 3 & 2 & 1 \\ 6 & 6 & 6 & 6 & 6 & 5 & 4 & 3 & 2 & 1 \\ 5 & 5 & 5 & 5 & 5 & 5 & 4 & 3 & 2 & 1 \\ 4 & 4 & 4 & 4 & 4 & 4 & 4 & 3 & 2 & 1 \\ 3 & 3 & 3 & 3 & 3 & 3 & 3 & 3 & 2 & 1 \\ 2 & 2 & 2 & 2 & 2 & 2 & 2 & 2 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ x_5 \\ x_6 \\ x_7 \\ x_8 \\ x_9 \\ x_{10} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 6 \\ 5 \\ 4 \\ 4 \\ 4 \\ 3 \\ 2 \\ 2 \\ 2 \\ 1 \end{bmatrix}$$

を解き, 解の改良を行う.

(b) 入力データ
係数行列 $A$, LNA=11, N=10, 定数ベクトル$\boldsymbol{b}$

(c) 主プログラム

```
      PROGRAM  BBGMLX
! *** EXAMPLE OF DBGMLX ***
      IMPLICIT REAL(8)(A-H,O-Z)
      PARAMETER ( LNA=11, LN=10)
      DIMENSION   A(LNA,LN), ALU(LNA,LN), B(LN), X(LN), W1(LN)
      INTEGER     IPVT(LN),NIT
!
      READ(5,*) N
      WRITE(6,1000) N
      READ(5,*) ((A(I,J),J=1,N),I=1,N)
      READ(5,*) (B(I),I=1,N)
      WRITE(6,1100)
      DO 10 I = 1,N
          WRITE(6,1200) (A(I,J),J=1,N)
```

```
   10 CONTINUE
      WRITE(6,1300)
      DO 20 I = 1,N
         WRITE(6,1400) B(I)
   20 CONTINUE
      DO 40 J = 1,N
         X(J) = B(J)
         DO 30 I = 1,N
            ALU(I,J) = A(I,J)
   30    CONTINUE
   40 CONTINUE
      CALL DBGMSL(ALU,LNA,N,X,IPVT,IERR)
      IF(IERR.GE.3000) STOP
      WRITE(6,1500)
      DO 50 I = 1,N
         WRITE(6,1600) I,X(I)
   50 CONTINUE
      ITOL = 0
      NIT = 0
      CALL DBGMLX(A,LNA,N,ALU,B,X,ITOL,NIT,IPVT,W1,IERR)
      WRITE(6,1700) IERR
      WRITE(6,1800)
      DO 60 I = 1,N
         WRITE(6,1600) I,X(I)
   60 CONTINUE
      STOP
 1000 FORMAT(' ',/,/,' *** DBGMLX ***',/,2X,'** INPUT **',/,&
             6X,'N = ',I5)
 1100 FORMAT(6X,'COEFFICIENT MATRIX A')
 1200 FORMAT(8X,10F7.1)
 1300 FORMAT(6X,'CONSTANT VECTOR')
 1400 FORMAT(8X,  F7.1)
 1500 FORMAT(6X,'ORIGINAL SOLUTION')
 1600 FORMAT(8X,'X(',I2,') = ',1PD18.10)
 1700 FORMAT(2X,'** OUTPUT **',/,6X,'IERR = ',I5)
 1800 FORMAT(6X,'IMPROVED SOLUTION')
      END
```

(d) 出力結果

```
 *** DBGMLX ***
  ** INPUT **
      N =    10
      COEFFICIENT MATRIX A
           10.0    9.0    8.0    7.0    6.0    5.0    4.0    3.0    2.0    1.0
            9.0    9.0    8.0    7.0    6.0    5.0    4.0    3.0    2.0    1.0
            8.0    8.0    8.0    7.0    6.0    5.0    4.0    3.0    2.0    1.0
            7.0    7.0    7.0    7.0    6.0    5.0    4.0    3.0    2.0    1.0
            6.0    6.0    6.0    6.0    6.0    5.0    4.0    3.0    2.0    1.0
            5.0    5.0    5.0    5.0    5.0    5.0    4.0    3.0    2.0    1.0
            4.0    4.0    4.0    4.0    4.0    4.0    4.0    3.0    2.0    1.0
            3.0    3.0    3.0    3.0    3.0    3.0    3.0    3.0    2.0    1.0
            2.0    2.0    2.0    2.0    2.0    2.0    2.0    2.0    2.0    1.0
            1.0    1.0    1.0    1.0    1.0    1.0    1.0    1.0    1.0    1.0
      CONSTANT VECTOR
            6.0
            5.0
            4.0
            4.0
            4.0
            3.0
            2.0
            2.0
            2.0
            1.0
      ORIGINAL SOLUTION
        X( 1) =   1.0000000000D+00
        X( 2) =  -1.2335811385D-16
        X( 3) =  -1.0000000000D+00
        X( 4) =  -2.5376526277D-16
        X( 5) =   1.0000000000D+00
        X( 6) =   7.9936057773D-16
        X( 7) =  -1.0000000000D+00
        X( 8) =  -7.4014868308D-17
        X( 9) =   1.0000000000D+00
        X(10) =   0.0000000000D+00
  ** OUTPUT **
      IERR =     0
      IMPROVED SOLUTION
        X( 1) =   1.0000000000D+00
        X( 2) =  -4.6838616247D-31
        X( 3) =  -1.0000000000D+00
        X( 4) =  -1.3312027776D-30
        X( 5) =   1.0000000000D+00
        X( 6) =  -1.9721522631D-31
        X( 7) =  -1.0000000000D+00
        X( 8) =  -9.8607613153D-32
        X( 9) =   1.0000000000D+00
        X(10) =   0.0000000000D+00
```

## 2.3 複素行列 (2 次元配列型)(実数引数型)

### 2.3.1 ZBGMSM, CBGMSM<br>多重右辺連立 1 次方程式 (複素行列)

(1) **機 能**

複素行列 $A$ (2 次元配列型) を係数行列とする連立 1 次方程式 $A\boldsymbol{x_i} = \boldsymbol{b_i} (i = 1, 2, \cdots, m)$ を, ガウス法を用いて解く. すなわち, $n \times m$ 行列 $B$ を $B = [\boldsymbol{b_1}, \boldsymbol{b_2}, \cdots, \boldsymbol{b_m}]$ と定義した時, $[\boldsymbol{x_1}, \boldsymbol{x_2}, \cdots, \boldsymbol{x_m}] = A^{-1}B$ を求める.

(2) **使用法**

倍精度サブルーチン:

CALL ZBGMSM (ABR, ABI, LNA, N, M, IPVT, W1, IERR)

単精度サブルーチン:

CALL CBGMSM (ABR, ABI, LNA, N, M, IPVT, W1, IERR)

(3) **引 数**

D:倍精度実数型 Z:倍精度複素数型
R:単精度実数型 C:単精度複素数型
I: $\left\{\begin{matrix}\text{32 ビット整数版では INTEGER(4)}\\\text{64 ビット整数版では INTEGER(8)}\end{matrix}\right\}$

| 項番 | 引数名 | 型 | 大きさ | 入出力 | 内容 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | ABR | $\left\{\begin{matrix}\mathrm{D}\\\mathrm{R}\end{matrix}\right\}$ | 内容参照 | 入 力 | 係数行列 $A$ と右辺ベクトル $\boldsymbol{b_i}$ からなる行列の実部 (複素行列, 2 次元配列型) $[A, \boldsymbol{b_1}, \boldsymbol{b_2}, \cdots, \boldsymbol{b_m}]$ **大きさ:** ((LNA, (N + M))) |
| | | | | 出 力 | 係数行列 $A$ の分解行列 $A'$ と解ベクトル $\boldsymbol{x_i}$ からなる行列の実部 (複素行列, 2 次元配列型) $[A', \boldsymbol{x_1}, \boldsymbol{x_2}, \cdots, \boldsymbol{x_m}]$ (注意事項 (a), (b) 参照) |
| 2 | ABI | $\left\{\begin{matrix}\mathrm{D}\\\mathrm{R}\end{matrix}\right\}$ | 内容参照 | 入 力 | 係数行列 $A$ と右辺ベクトル $\boldsymbol{b_i}$ からなる行列の虚部 (複素行列, 2 次元配列型) $[A, \boldsymbol{b_1}, \boldsymbol{b_2}, \cdots, \boldsymbol{b_m}]$ **大きさ:** ((LNA, (N + M))) |
| | | | | 出 力 | 係数行列 $A$ の分解行列 $A'$ と解ベクトル $\boldsymbol{x_i}$ からなる行列の虚部 (複素行列, 2 次元配列型) $[A', \boldsymbol{x_1}, \boldsymbol{x_2}, \cdots, \boldsymbol{x_m}]$ (注意事項 (a), (b) 参照) |
| 3 | LNA | I | 1 | 入 力 | 配列 ABR, ABI の整合寸法 |
| 4 | N | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の次数 |
| 5 | M | I | 1 | 入 力 | 右辺ベクトルの数 $m$ |
| 6 | IPVT | I | N | 出 力 | ピボッティング情報 IPVT(i) : i 段目の処理において行 i と交換した行の番号 (注意事項 (a) 参照) |
| 7 | W1 | $\left\{\begin{matrix}\mathrm{D}\\\mathrm{R}\end{matrix}\right\}$ | N | ワーク | 作業領域 |
| 8 | IERR | I | 1 | 出 力 | エラーインディケータ |

(4) **制限条件**

(a) $0 < \mathrm{N} \leq \mathrm{LNA}$

(b) $0 < \mathrm{M}$

(5) **エラーインディケータ**

| IERR の値 | 意　　　　味 | 処　理　内　容 |
|---|---|---|
| 0 | 正常終了. | |
| 1000 | $\mathrm{N} = 1$ であった. | $\mathrm{ABR}(1, \mathrm{N}+i) \leftarrow$<br>$\{\ \mathrm{ABR}(1, \mathrm{N}+i) \times \mathrm{ABR}(1,1)$<br>$+\ \mathrm{ABI}(1, \mathrm{N}+i) \times \mathrm{ABI}(1,1)\ \}$<br>$/\ \{\mathrm{ABR}(1,1)^2 + \mathrm{ABI}(1,1)^2\}$,<br>$\mathrm{ABI}(1, \mathrm{N}+i) \leftarrow$<br>$\{\ \mathrm{ABI}(1, \mathrm{N}+i) \times \mathrm{ABR}(1,1)$<br>$-\ \mathrm{ABR}(1, \mathrm{N}+i) \times \mathrm{ABI}(1,1)\ \}$<br>$/\ \{\mathrm{ABR}(1,1)^2 + \mathrm{ABI}(1,1)^2\}$<br>$(i = 1, 2, \ldots, \mathrm{M})$ とする. |
| 2100 | 係数行列 A の LU 分解の処理において, 対角要素が 0 に近いものがあった. 分解行列を使って求解もしくは逆行列を計算する場合, 精度の良い結果が得られない場合がある. | 処理を続ける. |
| 3000 | 制限条件 (a) を満足しなかった. | 処理を打ち切る. |
| 3010 | 制限条件 (b) を満足しなかった. | |
| $4000 + i$ | 係数行列 $A$ の LU 分解の $i$ 段目の処理において, ピボットが 0.0 となった.<br>$A$ は特異である. | |

(6) **注意事項**

(a) このサブルーチンでは, 係数行列 $A$ の LU 分解時に, 部分軸選択 (partial pivoting) が行われている. 第 i 段目のピボット行が第 j 行 ($\mathrm{i} \leq \mathrm{j}$) となった場合, IPVT(i) に j が格納される. また, このとき, 行列 $A$ の第 i 行と第 j 行の対応する列要素のうち, 第 1 列から第 n 列までの要素が実際に交換される.

(b) 配列 ABR, ABI の下三角部分に単位下三角行列 $L$ が符号をかえて, 上三角部分に上三角行列 $U$ が格納される. ただし, $L$ の対角成分は常に 1.0 であるので, 配列 ABR, ABI には格納されない. また, $U$ の対角成分はその逆数が格納される. 図 2−3 において, $\Re\{z\}$ と $\Im\{z\}$ はそれぞれ, 複素数 $z$ の実部と虚数部を表す.

図 2−3　行列 $L$ と行列 $U$ の格納状態

行列 $L$　　　　　　行列 $U$

$$
\begin{bmatrix}
1.0 & 0.0 & 0.0 & \cdots & 0.0 \\
l_{2,1} & 1.0 & 0.0 & \cdots & 0.0 \\
l_{3,1} & l_{3,2} & 1.0 & \cdots & 0.0 \\
\vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
l_{5,1} & l_{5,2} & l_{5,3} & \cdots & 1.0
\end{bmatrix}
\quad
\begin{bmatrix}
u_{1,1} & u_{1,2} & u_{1,3} & \cdots & u_{1,5} \\
0.0 & u_{2,2} & u_{2,3} & \cdots & u_{2,5} \\
0.0 & 0.0 & u_{3,3} & \cdots & u_{3,5} \\
\vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
0.0 & 0.0 & 0.0 & \cdots & u_{5,5}
\end{bmatrix}
$$

$$\Downarrow$$

配列ABR(LNA, K)の格納状態

$$
\begin{array}{|ccccc|}
\hline
\Re\{1/u_{1,1}\} & \Re\{u_{1,2}\} & \Re\{u_{1,3}\} & \cdots & \Re\{u_{1,5}\} \\
\Re\{-l_{1,2}\} & \Re\{1/u_{2,2}\} & \Re\{u_{2,3}\} & \cdots & \Re\{u_{2,5}\} \\
\Re\{-l_{1,3}\} & \Re\{-l_{2,3}\} & \Re\{1/u_{3,3}\} & \cdots & \Re\{u_{3,5}\} \\
\vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
\Re\{-l_{1,5}\} & \Re\{-l_{2,5}\} & \Re\{-l_{3,5}\} & \cdots & \Re\{1/u_{5,5}\} \\
\hline
\end{array}
$$

LNA　N

←−−−−−−−−−−−−−N−−−−−−−−−−−−−→
←−−−−−−−−−−−−−−−K−−−−−−−−−−−−−−−→

配列ABI(LNA, K)の格納状態

$$
\begin{array}{|ccccc|}
\hline
\Im\{1/u_{1,1}\} & \Im\{u_{1,2}\} & \Im\{u_{1,3}\} & \cdots & \Im\{u_{1,5}\} \\
\Im\{-l_{1,2}\} & \Im\{1/u_{2,2}\} & \Im\{u_{2,3}\} & \cdots & \Im\{u_{2,5}\} \\
\Im\{-l_{1,3}\} & \Im\{-l_{2,3}\} & \Im\{1/u_{3,3}\} & \cdots & \Im\{u_{3,5}\} \\
\vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
\Im\{-l_{1,5}\} & \Im\{-l_{2,5}\} & \Im\{-l_{3,5}\} & \cdots & \Im\{1/u_{5,5}\} \\
\hline
\end{array}
$$

LNA　N

←−−−−−−−−−−−−−N−−−−−−−−−−−−−→
←−−−−−−−−−−−−−−−K−−−−−−−−−−−−−−−→

**備　考**
a.　LNA $\geq$ N, N+M $\leq$ K を満たさなければならない.

## (7) 使用例

(a) 問 題

$$
\begin{bmatrix}
4+2i & 3+9i & 4+i & 7+9i \\
6+7i & 4i & 4+7i & 2+5i \\
9+3i & 6+2i & 9+5i & 8+5i \\
1+5i & 7+9i & 3+5i & 2+4i
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix}
x_{1,1} & x_{1,2} & x_{1,3} & x_{1,4} \\
x_{2,1} & x_{2,2} & x_{2,3} & x_{2,4} \\
x_{3,1} & x_{3,2} & x_{3,3} & x_{3,4} \\
x_{4,1} & x_{4,2} & x_{4,3} & x_{4,4}
\end{bmatrix}
=
\begin{bmatrix}
1 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 1 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 1 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 1
\end{bmatrix}
$$

を解く.

(b) 入力データ

係数行列 $A$ と定数ベクトル$\boldsymbol{b_1}, \cdots, \boldsymbol{b_4}$ からなる行列の実部 ABR および虚部 ABI, LNA=11, N=4, M=4

(c) 主プログラム

```
      PROGRAM ABGMSM
! *** EXAMPLE OF ZBGMSM ***
      IMPLICIT REAL(8) (A-H,O-Z)
      PARAMETER (LNA = 11)
      PARAMETER (LMA = 5)
      DIMENSION ABR(LNA,LNA+LMA),ABI(LNA,LNA+LMA),IPVT(LNA),W(LNA)
!
      READ (5,*) N
      READ (5,*) M
      WRITE (6,1000) N, M
      DO 10 I = 1, N
         READ (5,*) (ABR(I,J),ABI(I,J),J=1,N)
         WRITE (6,1100) (ABR(I,J),ABI(I,J),J=1,N)
   10 CONTINUE
      WRITE (6,1200)
      DO 20 I = 1, N
         READ (5,*) (ABR(I,N+J),ABI(I,N+J),J=1,M)
         WRITE (6,1100) (ABR(I,N+J),ABI(I,N+J),J=1,M)
   20 CONTINUE
      WRITE (6,1300)
      CALL ZBGMSM (ABR,ABI,LNA,N,M,IPVT,W,IERR)
```

```
      WRITE (6,1400) 'ZBGMSM',IERR
      IF (IERR .GE. 3000) STOP
      WRITE (6,1600)
      DO 30 I = 1, N
         WRITE (6,1100) (ABR(I,N+J),ABI(I,N+J),J=1,M)
   30 CONTINUE
      STOP
!
 1000 FORMAT(' ',/,/,&
             ' ***  ZBGMSM  ***',/,&
             2X,'**  INPUT  **',/,&
             6X,'N =',I3,/,&
             6X,'M =',I3,/,&
             6X,'COEFFICIENT MATRIX')
 1100 FORMAT(7X,4('(',F8.4,',',F8.4,')'))
 1200 FORMAT(6X,'CONSTANT VECTORS')
 1300 FORMAT(2X,'**  OUTPUT  **')
 1400 FORMAT(6X,'IERR (',A6,') =',I5)
 1600 FORMAT(6X,'SOLUTION')
      END
```

(d) 出力結果

```
***  ZBGMSM  ***
 **  INPUT  **
     N =  4
     M =  4
     COEFFICIENT MATRIX
      (  4.0000,  2.0000)(  3.0000,  9.0000)(  4.0000,  1.0000)(  7.0000,  9.0000)
      (  6.0000,  7.0000)(  0.0000,  4.0000)(  4.0000,  7.0000)(  2.0000,  5.0000)
      (  9.0000,  3.0000)(  6.0000,  2.0000)(  9.0000,  5.0000)(  8.0000,  5.0000)
      (  1.0000,  5.0000)(  7.0000,  9.0000)(  3.0000,  5.0000)(  2.0000,  4.0000)
     CONSTANT VECTORS
      (  1.0000,  0.0000)(  0.0000,  0.0000)(  0.0000,  0.0000)(  0.0000,  0.0000)
      (  0.0000,  0.0000)(  1.0000,  0.0000)(  0.0000,  0.0000)(  0.0000,  0.0000)
      (  0.0000,  0.0000)(  0.0000,  0.0000)(  1.0000,  0.0000)(  0.0000,  0.0000)
      (  0.0000,  0.0000)(  0.0000,  0.0000)(  0.0000,  0.0000)(  1.0000,  0.0000)
 **  OUTPUT  **
     IERR (ZBGMSM) =    0
     SOLUTION
      (  0.0133, -0.0730)(  0.1814, -0.2467)( -0.1840,  0.1782)( -0.1039, -0.0560)
      ( -0.0178, -0.0189)( -0.0680, -0.0696)( -0.0128,  0.1001)(  0.0415, -0.0657)
      ( -0.0353,  0.1382)( -0.0585,  0.1700)(  0.1333, -0.2410)(  0.1314,  0.0191)
      (  0.0494, -0.0686)( -0.0096,  0.1300)(  0.0885, -0.0709)( -0.0462,  0.0662)
```

## 2.3.2 ZBGMSL, CBGMSL
## 連立 1 次方程式 (複素行列)

(1) **機 能**

複素行列 $A = $ (AR, AI) (2 次元配列型) を係数行列とする連立 1 次方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ をガウス法またはクラウト法を用いて解く.

(2) **使用法**

倍精度サブルーチン:

CALL ZBGMSL (AR, AI, LNA, N, BR, BI, IPVT, W1, IERR)

単精度サブルーチン:

CALL CBGMSL (AR, AI, LNA, N, BR, BI, IPVT, W1, IERR)

(3) **引 数**

D:倍精度実数型　Z:倍精度複素数型　I: {32 ビット整数版では INTEGER(4), 64 ビット整数版では INTEGER(8)}
R:単精度実数型　C:単精度複素数型

| 項番 | 引数名 | 型 | 大きさ | 入出力 | 内　容 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | AR | {D, R} | LNA, N | 入 力 | 係数行列 $A$ の実部 (複素行列, 2 次元配列型) |
| | | | | 出 力 | $A = LU$ と分解したときの, 上三角行列 $U$, および下三角行列 $L$ の実部 (注意事項 (b), (c) 参照) |
| 2 | AI | {D, R} | LNA, N | 入 力 | 係数行列 $A$ の虚部 (複素行列, 2 次元配列型) |
| | | | | 出 力 | $A = LU$ と分解したときの, 上三角行列 $U$, および下三角行列 $L$ の虚部 (注意事項 (b), (c) 参照) |
| 3 | LNA | I | 1 | 入 力 | 配列 AR, AI の整合寸法 |
| 4 | N | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の次数 |
| 5 | BR | {D, R} | N | 入 力 | 定数ベクトル$\boldsymbol{b}$の実部 |
| | | | | 出 力 | 解$\boldsymbol{x}$の実部 |
| 6 | BI | {D, R} | N | 入 力 | 定数ベクトル$\boldsymbol{b}$の虚部 |
| | | | | 出 力 | 解$\boldsymbol{x}$の虚部 |
| 7 | IPVT | I | N | 出 力 | ピボッティング情報 IPVT(i) : i 段目の処理において行 i と交換した行の番号 (注意事項 (b) 参照) |
| 8 | W1 | {D, R} | N | ワーク | 作業領域 |
| 9 | IERR | I | 1 | 出 力 | エラーインディケータ |

(4) **制限条件**

(a) $0 < \mathrm{N} \leq \mathrm{LNA}$

### (5) エラーインディケータ

| IERR の値 | 意　　　味 | 処　理　内　容 |
|---|---|---|
| 0 | 正常終了. | |
| 1000 | N = 1 であった. | $\mathrm{BR}(1) \leftarrow \{\mathrm{BR}(1) \times \mathrm{AR}(1,1) + \mathrm{BI}(1) \times \mathrm{AI}(1,1)\}/\{\mathrm{AR}(1,1)^2 + \mathrm{AI}(1,1)^2\}$<br>$\mathrm{BI}(1) \leftarrow \{\mathrm{BI}(1) \times \mathrm{AR}(1,1) - \mathrm{BR}(1) \times \mathrm{AI}(1,1)\}/\{\mathrm{AR}(1,1)^2 + \mathrm{AI}(1,1)^2\}$<br>とする. |
| 2100 | 係数行列 A の LU 分解の処理において, 対角要素が 0 に近いものがあった. 分解行列を使って求解もしくは逆行列を計算する場合, 精度の良い結果が得られない場合がある. | 処理を続ける. |
| 3000 | 制限条件 (a) を満足しなかった. | 処理を打ち切る. |
| $4000 + i$ | 係数行列 $A$ の LU 分解の $i$ 段目の処理において, ピボットが 0.0 となった.<br>$A$ は特異である. | |

### (6) 注意事項

(a) 定数ベクトル$\boldsymbol{b}$のみが異なる複数の連立 1 次方程式を解く場合には, 直接サブルーチン 2.3.1 $\left\{\begin{matrix}\mathrm{ZBGMSM}\\ \mathrm{CBGMSM}\end{matrix}\right\}$ を用いて計算する方が効率よく解が求まる. ただし, 右辺ベクトル$\boldsymbol{b}$のすべてが前もって分からない場合など, 2.3.1 $\left\{\begin{matrix}\mathrm{ZBGMSM}\\ \mathrm{CBGMSM}\end{matrix}\right\}$を利用できない場合には, このサブルーチンを一度使用した後, 続けてサブルーチン 2.3.5 $\left\{\begin{matrix}\mathrm{ZBGMLS}\\ \mathrm{CBGMLS}\end{matrix}\right\}$を配列 B の内容のみを変えて使用すればよい. このようにすれば, 行列 $A$ の LU 分解が一度だけしか行われないため, 効率よく解が求まる.

(b) このサブルーチンでは, 係数行列 $A$ の LU 分解時に, 部分軸選択 (partial pivoting) が行われている. 第 i 段目のピボット行が第 j 行 ($\mathrm{i} \leq \mathrm{j}$) となった場合, IPVT(i) に j が格納される. また, このとき, 行列 $A$ の第 i 行と第 j 行の対応する列要素のうち, 第 1 列から第 n 列までの要素が実際に交換される.

(c) 配列 AR, AI の下三角部分に単位下三角行列 $L$ が符号をかえて, 上三角部分に上三角行列 $U$ が格納される. ただし, $L$ の対角成分は常に 1.0 であるので, 配列 AR, AI には格納されない. また, $U$ の対角成分はその逆数が格納される. 図 2–4 において, $\Re\{z\}$ と $\Im\{z\}$ はそれぞれ, 複素数 $z$ の実部と虚数部を表す.

図 2−4　行列 $L$ と行列 $U$ の格納状態

行列 $L$　　　　行列 $U$

$$
\begin{bmatrix}
1.0 & 0.0 & 0.0 & \cdots & 0.0 \\
l_{2,1} & 1.0 & 0.0 & \cdots & 0.0 \\
l_{3,1} & l_{3,2} & 1.0 & \cdots & 0.0 \\
\vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
l_{5,1} & l_{5,2} & l_{5,3} & \cdots & 1.0
\end{bmatrix}
\quad
\begin{bmatrix}
u_{1,1} & u_{1,2} & u_{1,3} & \cdots & u_{1,5} \\
0.0 & u_{2,2} & u_{2,3} & \cdots & u_{2,5} \\
0.0 & 0.0 & u_{3,3} & \cdots & u_{3,5} \\
\vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
0.0 & 0.0 & 0.0 & \cdots & u_{5,5}
\end{bmatrix}
$$

$$\Downarrow$$

配列AR(LNA, K)の格納状態

$$
\begin{array}{ccccc}
\Re\{1/u_{1,1}\} & \Re\{u_{1,2}\} & \Re\{u_{1,3}\} & \cdots & \Re\{u_{1,5}\} \\
\Re\{-l_{1,2}\} & \Re\{1/u_{2,2}\} & \Re\{u_{2,3}\} & \cdots & \Re\{u_{2,5}\} \\
\Re\{-l_{1,3}\} & \Re\{-l_{2,3}\} & \Re\{1/u_{3,3}\} & \cdots & \Re\{u_{3,5}\} \\
\vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
\Re\{-l_{1,5}\} & \Re\{-l_{2,5}\} & \Re\{-l_{3,5}\} & \cdots & \Re\{1/u_{5,5}\}
\end{array}
$$

LNA　N

←−−−−−−−−−−−−−N−−−−−−−−−−−−−→

←−−−−−−−−−−−−−−−K−−−−−−−−−−−−−−−→

配列AI(LNA, K)の格納状態

$$
\begin{array}{ccccc}
\Im\{1/u_{1,1}\} & \Im\{u_{1,2}\} & \Im\{u_{1,3}\} & \cdots & \Im\{u_{1,5}\} \\
\Im\{-l_{1,2}\} & \Im\{1/u_{2,2}\} & \Im\{u_{2,3}\} & \cdots & \Im\{u_{2,5}\} \\
\Im\{-l_{1,3}\} & \Im\{-l_{2,3}\} & \Im\{1/u_{3,3}\} & \cdots & \Im\{u_{3,5}\} \\
\vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
\Im\{-l_{1,5}\} & \Im\{-l_{2,5}\} & \Im\{-l_{3,5}\} & \cdots & \Im\{1/u_{5,5}\}
\end{array}
$$

LNA　N

←−−−−−−−−−−−−−N−−−−−−−−−−−−−→

←−−−−−−−−−−−−−−−K−−−−−−−−−−−−−−−→

**備　考**

a.　LNA $\geq$ N, N $\leq$ K を満たさなければならない.

(7) **使用例**

(a) 問 題

$$
\begin{bmatrix}
5+8i & 7+i & 6+3i & 1+2i \\
1+i & 9+5i & 4+i & 5 \\
4i & 3+3i & 4+2i & 6+9i \\
7+8i & 6 & 7+6i & 10+4i
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix}
=
\begin{bmatrix} 3+20i \\ -6+7i \\ -6i \\ 13i \end{bmatrix}
$$

を解く.

(b) 入力データ

係数行列の実部 AR および虚部 AI, LNA = 11, N = 4, 定数ベクトル$\boldsymbol{b}$

(c) 主プログラム

```
      PROGRAM ABGMSL
!     *** EXAMPLE OF ZBGMLC,ZBGMLS ***
      IMPLICIT REAL(8) (A-H,O-Z)
      PARAMETER (LNA = 11,LNW = 22)
      DIMENSION AR(LNA,LNA),AI(LNA,LNA),BR(LNA),BI(LNA),IPVT(LNA)
      DIMENSION W1(LNW)
!
      READ (5,*) N
      WRITE (6,1000) N
      DO 10 I = 1, N
         READ (5,*) (AR(I,J),AI(I,J),J=1,N)
         WRITE (6,1100) (AR(I,J),AI(I,J),J=1,N)
   10 CONTINUE
      READ (5,*) (BR(I),BI(I),I=1,N)
      WRITE (6,1200)
      DO 20 I = 1, N
         WRITE (6,1300) BR(I),BI(I)
   20 CONTINUE
      WRITE (6,1400)
      CALL ZBGMLC (AR,AI,LNA,N,IPVT,COND,W1,IERR)
      WRITE (6,1500) 'ZBGMLC',IERR
      IF (IERR .GE. 3000) STOP
      COND = 1.0D0/COND
```

```
      CALL ZBGMLS (AR,AI,LNA,N,BR,BI,IPVT,KERR)
      WRITE (6,1500) 'ZBGMLS',KERR
      WRITE (6,1600) COND
      WRITE (6,1700)
      DO 30 I = 1, N
         WRITE (6,1800) I,BR(I),BI(I)
   30 CONTINUE
      STOP
!
 1000 FORMAT (' ',/,/,' ***  ZBGMLC,ZBGMLS  ***',&
             /,2X,'**  INPUT  **',&
             /,6X,'N =',I3,&
             /,6X,'COEFFICIENT MATRIX ( REAL, IMAGINARY )')
 1100 FORMAT (6X,4(' (',F5.1,' ,',F5.1,' )'))
 1200 FORMAT (6X,'CONSTANT VECTOR ( REAL, IMAGINARY )')
 1300 FORMAT (6X,  ' (',F5.1,' ,',F5.1,' )')
 1400 FORMAT (2X,'**  OUTPUT  **')
 1500 FORMAT (6X,'IERR (',A6,') =',I5)
 1600 FORMAT (6X,'CONDITION NUMBER =',D18.10)
 1700 FORMAT (6X,'SOLUTION ( REAL, IMAGINARY )')
 1800 FORMAT (6X,'    X(',I2,') = (',D18.10,' ,',D18.10,' )')
      END
```

(d) 出力結果

```
 ***  ZBGMLC,ZBGMLS  ***
  **  INPUT  **
      N =  4
      COEFFICIENT MATRIX ( REAL, IMAGINARY )
       (  5.0 ,  8.0 ) (  7.0 ,  1.0 ) (  6.0 ,  3.0 ) (  1.0 ,  2.0 )
       (  1.0 ,  1.0 ) (  9.0 ,  5.0 ) (  4.0 ,  1.0 ) (  5.0 ,  0.0 )
       (  0.0 ,  4.0 ) (  3.0 ,  3.0 ) (  4.0 ,  2.0 ) (  6.0 ,  9.0 )
       (  7.0 ,  8.0 ) (  6.0 ,  0.0 ) (  7.0 ,  6.0 ) ( 10.0 ,  4.0 )
      CONSTANT VECTOR ( REAL, IMAGINARY )
       (  3.0 , 20.0 )
       ( -6.0 ,  7.0 )
       (  0.0 , -6.0 )
       (  0.0 , 13.0 )
  **  OUTPUT  **
      IERR (ZBGMLC) =    0
      IERR (ZBGMLS) =    0
      CONDITION NUMBER =  0.6279263302D+01
      SOLUTION ( REAL, IMAGINARY )
          X( 1) = (  0.1000000000D+01 ,  0.1000000000D+01 )
          X( 2) = ( -0.2220446049D-15 ,  0.1000000000D+01 )
          X( 3) = (  0.1000000000D+01 , -0.4996003611D-15 )
          X( 4) = ( -0.1000000000D+01 , -0.1000000000D+01 )
```

## 2.3.3 ZBGMLU, CBGMLU<br>複素行列の LU 分解

(1) **機 能**

複素行列 $A$=(AR, AI) (2 次元配列型) をガウス法またはクラウト法を用いて LU 分解する．

(2) **使用法**

倍精度サブルーチン:

CALL ZBGMLU (AR, AI, LNA, N, IPVT, W1, IERR)

単精度サブルーチン:

CALL CBGMLU (AR, AI, LNA, N, IPVT, W1, IERR)

(3) **引 数**

D:倍精度実数型　Z:倍精度複素数型　I: $\left\{\begin{array}{l}\text{32 ビット整数版では INTEGER(4)}\\\text{64 ビット整数版では INTEGER(8)}\end{array}\right\}$
R:単精度実数型　C:単精度複素数型

| 項番 | 引数名 | 型 | 大きさ | 入出力 | 内　容 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | AR | $\begin{Bmatrix}D\\R\end{Bmatrix}$ | LNA, N | 入 力 | 複素行列 $A$ の実部 (2 次元配列型) |
| | | | | 出 力 | $A = LU$ と分角したときの, 上三角行列 $U$, および下三角行列 $L$ の実部 (注意事項 (a), (b) 参照) |
| 2 | AI | $\begin{Bmatrix}D\\R\end{Bmatrix}$ | LNA, N | 入 力 | 複素行列 $A$ の虚部 (2 次元配列型) |
| | | | | 出 力 | $A = LU$ と分解したときの, 上三角行列 $U$, および下三角行列 $L$ の虚部 (注意事項 (a), (b) 参照) |
| 3 | LNA | I | 1 | 入 力 | 配列 AR, AI の整合寸法 |
| 4 | N | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の次数 |
| 5 | IPVT | I | N | 出 力 | ピボッティング情報 IPVT(i) :<br>i 段目の処理において行 i と交換した行の番号 (注意事項 (b) 参照) |
| 6 | W1 | $\begin{Bmatrix}D\\R\end{Bmatrix}$ | N | ワーク | 作業領域 |
| 7 | IERR | I | 1 | 出 力 | エラーインディケータ |

(4) **制限条件**

(a) $0 < \mathrm{N} \leq \mathrm{LNA}$

(5) **エラーインディケータ**

| IERR の値 | 意　　　　　味 | 処　理　内　容 |
|---|---|---|
| 0 | 正常終了. | |
| 1000 | N = 1 であった. | 配列 AR, AI の内容は変更されない. |
| 2100 | 係数行列 A の LU 分解の処理において, 対角要素が 0 に近いものがあった. 分解行列を使って求解もしくは逆行列を計算する場合, 精度の良い結果が得られない場合がある. | 処理を続ける. |
| 3000 | 制限条件 (a) を満足しなかった. | 処理を打ち切る. |
| $4000+i$ | $i$ 段目の処理において, ピボットが 0.0 となった.<br>$A$ は特異である. | |

(6) **注意事項**

(a) 配列 AR, AI には, 下三角部分に単位下三角行列 $L$ が符号をかえて, 上三角部分に上三角行列 $U$ が格納される. ただし, 行列 $L$ の対角成分は常に 1.0 であるので, 配列 AR, AI には格納されない. また $U$ の対角成分は, その逆数が格納される (2.3.2 図 2−4 参照).

(b) このサブルーチンにおいては, 部分軸選択 (partial pivoting) が行われている. このときの情報は後続のサブルーチンで使用されるため, 配列 IPVT に格納される. 第 i 段目のピボット行が第 j 行 (i ≤ j) となった場合, IPVT(i) に j が格納される. また, このとき行列 $A$ の第 i 行と第 j 行の対応する列要素のうち, 第 1 列から第 n 列までの要素が実際に交換される.

## 2.3.4 ZBGMLC, CBGMLC 複素行列の LU 分解と条件数

(1) **機 能**

複素行列 $A$=(AR, AI) (2 次元配列型) をガウス法またはクラウト法を用いて LU 分解し, 条件数を求める.

(2) **使用法**

倍精度サブルーチン:

CALL ZBGMLC (AR, AI, LNA, N, IPVT, COND, W1, IERR)

単精度サブルーチン:

CALL CBGMLC (AR, AI, LNA, N, IPVT, COND, W1, IERR)

(3) **引 数**

D:倍精度実数型　Z:倍精度複素数型　I: { 32 ビット整数版では INTEGER(4) / 64 ビット整数版では INTEGER(8) }
R:単精度実数型　C:単精度複素数型

| 項番 | 引数名 | 型 | 大きさ | 入出力 | 内容 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | AR | {D/R} | LNA, N | 入 力 | 複素行列 $A$ の実部 (2 次元配列型) |
| | | | | 出 力 | $A = LU$ と分解したときの, 上三角行列 $U$, および下三角行列 $L$ の実部 (注意事項 (a), (b) 参照) |
| 2 | AI | {D/R} | LNA, N | 入 力 | 複素行列 $A$ の虚部 (2 次元配列型) |
| | | | | 出 力 | $A = LU$ と分解したときの, 上三角行列 $U$, および下三角行列 $L$ の虚部 (注意事項 (a), (b) 参照) |
| 3 | LNA | I | 1 | 入 力 | 配列 AR, AI の整合寸法 |
| 4 | N | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の次数 |
| 5 | IPVT | I | N | 出 力 | ピボッティング情報 IPVT(i) :<br>i 段目の処理において行 i と交換した行の番号 (注意事項 (b) 参照) |
| 6 | COND | {D/R} | 1 | 出 力 | 条件数の逆数 |
| 7 | W1 | {D/R} | 2 × N | ワーク | 作業領域 |
| 8 | IERR | I | 1 | 出 力 | エラーインディケータ |

(4) **制限条件**

(a) $0 < \mathrm{N} \leq \mathrm{LNA}$

(5) **エラーインディケータ**

| IERR の値 | 意　　　味 | 処　理　内　容 |
|---|---|---|
| 0 | 正常終了. | |
| 1000 | N = 1 であった. | 配列 AR, AI の内容は変更されない.<br>COND ← 1.0 とする. |
| 2100 | 係数行列 A の LU 分解の処理において, 対角要素が 0 に近いものがあった. 分解行列を使って求解もしくは逆行列を計算する場合, 精度の良い結果が得られない場合がある. | 処理を続ける. |
| 3000 | 制限条件 (a) を満足しなかった. | 処理を打ち切る. |
| $4000 + i$ | $i$ 段目の処理において, ピボットが 0.0 となった.<br>$A$ は特異である. | 処理を打ち切る.<br>条件数は求められない. |

(6) **注意事項**

(a) 配列 AR, AI には, 下三角部分に単位下三角行列 $L$ が符号をかえて, 上三角部分に上三角行列 $U$ が格納される. ただし, 行列 $L$ の対角成分は常に 1.0 であるので, 配列 AR, AI には格納されない. また, $U$ の対角成分はその逆数が格納される (2.3.2 図 2−4 参照).

(b) このサブルーチンにおいては, 部分軸選択 (partial pivoting) が行われている. このときの情報は後続のサブルーチンで使用されるため, 配列 IPVT に格納される. 第 i 段目のピボット行が第 j 行 (i ≤ j) となった場合, IPVT(i) に j が格納される. また, このとき, 行列 $A$ の第 i 行と第 j 行の対応する列要素のうち, 第 1 列から第 n 列までの要素が実際に交換される.

(c) 条件数は $\|A\| \cdot \|A^{-1}\|$ で定義されるが, このサブルーチンで求められる値はその概算値である.

### 2.3.5 ZBGMLS, CBGMLS
**連立 1 次方程式 (LU 分解後の複素行列)**

(1) **機 能**

ガウス法またはクラウト法で LU 分解された複素行列 $A$=(AR, AI) (2 次元配列型) を係数行列とする連立 1 次方程式 $LU\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ を解く.

(2) **使用法**

倍精度サブルーチン:

CALL ZBGMLS (AR, AI, LNA, N, BR, BI, IPVT, IERR)

単精度サブルーチン:

CALL CBGMLS (AR, AI, LNA, N, BR, BI, IPVT, IERR)

(3) **引 数**

D:倍精度実数型　Z:倍精度複素数型
R:単精度実数型　C:単精度複素数型
I: {32 ビット整数版では INTEGER(4) / 64 ビット整数版では INTEGER(8)}

| 項番 | 引数名 | 型 | 大きさ | 入出力 | 内　容 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | AR | {D/R} | LNA, N | 入 力 | LU 分解後の係数行列 $A$ の実部 (複素行列, 2 次元配列型) (注意事項 (a), (b) 参照) |
| 2 | AI | {D/R} | LNA, N | 入 力 | LU 分解後の係数行列 $A$ の虚部 (複素行列, 2 次元配列型) (注意事項 (a), (b) 参照) |
| 3 | LNA | I | 1 | 入 力 | 配列 AR, AI の整合寸法 |
| 4 | N | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の次数 |
| 5 | BR | {D/R} | N | 入 力 | 定数ベクトル $\boldsymbol{b}$ の実部 |
| | | | | 出 力 | 解$\boldsymbol{x}$の実部 |
| 6 | BI | {D/R} | N | 入 力 | 定数ベクトル $\boldsymbol{b}$ の虚部 |
| | | | | 出 力 | 解$\boldsymbol{x}$の虚部 |
| 7 | IPVT | I | N | 入 力 | ピボッティング情報 IPVT(i) :<br>LU 分解の i 段目の処理において行 i と交換した行の番号 (注意事項 (c) 参照) |
| 8 | IERR | I | 1 | 出 力 | エラーインディケータ |

(4) **制限条件**

(a) $0 < \mathrm{N} \leq \mathrm{LNA}$

(5) **エラーインディケータ**

| IERR の値 | 意　　　味 | 処　理　内　容 |
|---|---|---|
| 0 | 正常終了. | |
| 1000 | N = 1 であった. | $\mathrm{BR}(1) \leftarrow \{\mathrm{BR}(1) \times \mathrm{AR}(1,1) + \mathrm{BI}(1) \times \mathrm{AI}(1,1)\}/\{\mathrm{AR}(1,1)^2 + \mathrm{AI}(1,1)^2\}$<br>$\mathrm{BI}(1) \leftarrow \{\mathrm{BI}(1) \times \mathrm{AR}(1,1) - \mathrm{BR}(1) \times \mathrm{AI}(1,1)\}/\{\mathrm{AR}(1,1)^2 + \mathrm{AI}(1,1)^2\}$ |
| 3000 | 制限条件 (a) を満足しなかった. | 処理を打ち切る. |

(6) **注意事項**

(a) このサブルーチンを使用するには, 係数行列 $A$=(AR, AI) を LU 分解しておく必要がある. 通常は 2.3.3 $\left\{\begin{matrix}\mathrm{ZBGMLU}\\ \mathrm{CBGMLU}\end{matrix}\right\}$ を使用して分解するが, 条件数も求めたい場合は 2.3.4 $\left\{\begin{matrix}\mathrm{ZBGMLC}\\ \mathrm{CBGMLC}\end{matrix}\right\}$ を使用する. また, 2.3.2 $\left\{\begin{matrix}\mathrm{ZBGMSL}\\ \mathrm{CBGMSL}\end{matrix}\right\}$ を使用して同一の係数行列 $A$ を持つ連立 1 次方程式をすでに解いている場合は, その出力として得られる LU 分解を利用することもできる. 定数ベクトル $b$ のみが異なる複数の連立 1 次方程式を解く場合には, 直接サブルーチン 2.3.6 $\left\{\begin{matrix}\mathrm{ZBGMMS}\\ \mathrm{CBGMMS}\end{matrix}\right\}$ を用いて計算する方が効率良く解が求まる.

(b) 配列 AR, AI には, 下三角部分に単位下三角行列 $L$ が符号をかえて, 上三角部分に上三角行列 $U$ が格納されていなければならない. ただし, 行列 $L$ の対角成分は常に 1.0 であるので, 配列 AR, AI には格納されていなくてよい. また, $U$ の対角成分は, その逆数が格納されていなければならない (2.3.2 図 2−4 参照).

(c) IPVT には, LU 分解時に行った部分軸選択 (partial pivoting) についての情報が格納されていなければならない. この情報は, 2.3.3 $\left\{\begin{matrix}\mathrm{ZBGMLU}\\ \mathrm{CBGMLU}\end{matrix}\right\}$, 2.3.4 $\left\{\begin{matrix}\mathrm{ZBGMLC}\\ \mathrm{CBGMLC}\end{matrix}\right\}$, 2.3.2 $\left\{\begin{matrix}\mathrm{ZBGMSL}\\ \mathrm{CBGMSL}\end{matrix}\right\}$ によって与えられる.

## 2.3.6 ZBGMMS, CBGMMS 多重右辺連立 1 次方程式 (LU 分解後の複素行列)

(1) **機 能**

ガウス法またはクラウト法で LU 分解された複素行列 $A$=(AR, AI) (2 次元配列型) を係数行列とする連立 1 次方程式 $LU\boldsymbol{x}_i = \boldsymbol{b}_i (i = 1, 2, \cdots, m)$ を解く．すなわち，$n \times m$ 行列 $B$ を $B = [\boldsymbol{b}_1, \boldsymbol{b}_2, \cdots, \boldsymbol{b}_m]$ と定義した時，$[\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \cdots, \boldsymbol{x}_m] = A^{-1}B$ を求める．

(2) **使用法**

倍精度サブルーチン:

CALL ZBGMMS (AR, AI, LNA, N, BR, BI, LNB, M, IPVT, IERR)

単精度サブルーチン:

CALL CBGMMS (AR, AI, LNA, N, BR, BI, LNB, M, IPVT, IERR)

(3) **引 数**

D:倍精度実数型　Z:倍精度複素数型　I: {32 ビット整数版では INTEGER(4) / 64 ビット整数版では INTEGER(8)}
R:単精度実数型　C:単精度複素数型

| 項番 | 引数名 | 型 | 大きさ | 入出力 | 内容 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | AR | {D/R} | LNA, N | 入 力 | LU 分解後の係数行列 $A$ の実部 (複素行列, 2 次元配列型) (注意事項 (a), (b) 参照) |
| 2 | AI | {D/R} | LNA, N | 入 力 | LU 分解後の係数行列 $A$ の虚部 (複素行列, 2 次元配列型) (注意事項 (a), (b) 参照) |
| 3 | LNA | I | 1 | 入 力 | 配列 AR, AI の整合寸法 |
| 4 | N | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の次数 |
| 5 | BR | {D/R} | LNB, M | 入 力 | 定数ベクトル $\boldsymbol{b}$ の実部 |
| | | | | 出 力 | 解$\boldsymbol{x}$の実部 |
| 6 | BI | {D/R} | LNB, M | 入 力 | 定数ベクトル $\boldsymbol{b}$ の虚部 |
| | | | | 出 力 | 解$\boldsymbol{x}$の虚部 |
| 7 | LNB | I | 1 | 入 力 | 配列 BR, BI の整合寸法 |
| 8 | M | I | 1 | 入 力 | 行列 $B$ の次数 |
| 9 | IPVT | I | N | 入 力 | ピボッティング情報 IPVT(i)：LU 分解の i 段目の処理において行 i と交換した行の番号 (注意事項 (c) 参照) |
| 10 | IERR | I | 1 | 出 力 | エラーインディケータ |

(4) **制限条件**

(a) $0 < \mathrm{N} \leq \mathrm{LNA}, \mathrm{LNB}$

(b) $\mathrm{M} > 0$

(c) $0 < \mathrm{IPVT}(i) \leq \mathrm{N} \quad (i = 1, \ldots, \mathrm{N})$

(5) **エラーインディケータ**

| IERR の値 | 意　　味 | 処　理　内　容 |
|---|---|---|
| 0 | 正常終了. | |
| 1000 | N = 1 であった. | BR (1,$i$) ← { BR (1,$i$) ×AR (1,1) +BI (1,$i$) ×AI (1,1) } / { AR (1,1) $^2$+ AI (1,1) $^2$ } BI (1,$i$) ← { BI (1,$i$) ×AR (1,1) −BR (1,$i$) ×AI (1,1) } / { AR (1,1) $^2$+ AI (1,1) $^2$ } ($i$ =1,2,· · ·,M) とする. |
| 3000 | 制限条件 (a) を満足しなかった. | 処理を打ち切る. |
| 3010 | 制限条件 (b) を満足しなかった. | |
| 3020 | 制限条件 (c) を満足しなかった. | |

(6) **注意事項**

(a) このサブルーチンを使用するには, 係数行列 $A$=(AR, AI) を LU 分解しておく必要がある. 通常は 2.3.3 $\left\{\begin{array}{l}\text{ZBGMLU}\\ \text{CBGMLU}\end{array}\right\}$ を使用して分解するが, 条件数も求めたい場合は 2.3.4 $\left\{\begin{array}{l}\text{ZBGMLC}\\ \text{CBGMLC}\end{array}\right\}$ を使用する. また, 2.3.2 $\left\{\begin{array}{l}\text{ZBGMSL}\\ \text{CBGMSL}\end{array}\right\}$ を使用して同一の係数行列 $A$ を持つ連立 1 次方程式をすでに解いている場合は, その出力として得られる LU 分解を利用することもできる.

(b) 配列 AR, AI には, 下三角部分に単位下三角行列 $L$ が符号をかえて, 上三角部分に上三角行列 $U$ が格納されていなければならない. ただし, 行列 $L$ の対角成分は常に 1.0 であるので, 配列 AR, AI には格納されていなくてよい. また, $U$ の対角成分は, その逆数が格納されていなければならない (2.3.2 図 2−4 参照).

(c) IPVT には, LU 分解時に行った部分軸選択 (partial pivoting) についての情報が格納されていなければならない. この情報は, 2.3.3 $\left\{\begin{array}{l}\text{ZBGMLU}\\ \text{CBGMLU}\end{array}\right\}$, 2.3.4 $\left\{\begin{array}{l}\text{ZBGMLC}\\ \text{CBGMLC}\end{array}\right\}$, 2.3.2 $\left\{\begin{array}{l}\text{ZBGMSL}\\ \text{CBGMSL}\end{array}\right\}$ によって与えられる.

(7) **使用例**

(a) 問 題

$$\begin{bmatrix} 4+2i & 3+9i & 4+i & 7+9i \\ 6+7i & 4i & 4+7i & 2+5i \\ 9+3i & 6+2i & 9+5i & 8+5i \\ 1+5i & 7+9i & 3+5i & 2+4i \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_{1,1} & x_{1,2} & x_{1,3} & x_{1,4} \\ x_{2,1} & x_{2,2} & x_{2,3} & x_{2,4} \\ x_{3,1} & x_{3,2} & x_{3,3} & x_{3,4} \\ x_{4,1} & x_{4,2} & x_{4,3} & x_{4,4} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

を解く.

(b) 入力データ

係数行列 $A$ の実部 AR および虚部 AI と, 定数ベクトル$\boldsymbol{b_1}$, · · ·,$\boldsymbol{b_4}$からなる行列の実部 BR および虚部 BI, LNA=11, LNB=11, N=4, M=4

(c) 主プログラム

```
      PROGRAM ABGMMS
! *** EXAMPLE OF ZBGMMS ***
      IMPLICIT NONE
      INTEGER LNA,LNB,LMB
      PARAMETER( LNA = 11, LNB = 11, LMB = 5 )
      INTEGER N,M,IPVT(LNA),IERR
      INTEGER I,J
```

```
      REAL(8) AR(LNA,LNA),BR(LNB,LMB)
      REAL(8) AI(LNA,LNA),BI(LNB,LMB)
      REAL(8) W(LNA)
!
      DATA (AR(1,J),J=1,4) / 4.0D0, 3.0D0, 4.0D0, 7.0D0 /
      DATA (AR(2,J),J=1,4) / 6.0D0, 0.0D0, 4.0D0, 2.0D0 /
      DATA (AR(3,J),J=1,4) / 9.0D0, 6.0D0, 9.0D0, 8.0D0 /
      DATA (AR(4,J),J=1,4) / 1.0D0, 7.0D0, 3.0D0, 2.0D0 /
      DATA (AI(1,J),J=1,4) / 2.0D0, 9.0D0, 1.0D0, 9.0D0 /
      DATA (AI(2,J),J=1,4) / 7.0D0, 4.0D0, 7.0D0, 5.0D0 /
      DATA (AI(3,J),J=1,4) / 3.0D0, 2.0D0, 5.0D0, 5.0D0 /
      DATA (AI(4,J),J=1,4) / 5.0D0, 9.0D0, 5.0D0, 4.0D0 /
!
      N = 4
      M = 4
      DO 100 J=1,M
      DO 101 I=1,N
         BR(I,J) = 0.0D0
         BI(I,J) = 0.0D0
  101 CONTINUE
  100 CONTINUE
      DO 110 I=1,N
         BR(I,I) = 1.0D0
  110 CONTINUE
!
      WRITE(6,6000) N, M
      DO 120 I = 1, N
         WRITE(6,6010) (AR(I,J),AI(I,J),J=1,N)
  120 CONTINUE
      WRITE(6,6020)
      DO 130 I=1,N
         WRITE(6,6010) (BR(I,J),BI(I,J),J=1,M)
  130 CONTINUE
!
      WRITE(6,6030)
      CALL ZBGMLU(AR,AI,LNA,N,IPVT,W,IERR)
      IF( IERR .GE. 3000 ) THEN
         WRITE(6,6040) IERR
         STOP
      ENDIF
      CALL ZBGMMS(AR,AI,LNA,N,BR,BI,LNB,M,IPVT,IERR)
      WRITE(6,6050) IERR
      IF( IERR .GE. 3000 ) STOP
      WRITE(6,6060)
      DO 140 I=1,N
         WRITE(6,6010) (BR(I,J),BI(I,J),J=1,M)
  140 CONTINUE
      STOP
!
 6000 FORMAT(/,&
             1X,'***  ZBGMMS  ***',/,/,&
             1X,' **  INPUT  **',/,/,&
             1X,'     N =',I3,/,&
             1X,'     M =',I3,/,/,&
             1X,'     COEFFICIENT MATRIX ( REAL, IMAGINARY )')
 6010 FORMAT(1X,'     ',4(' (',F7.4,',',F7.4,')'))
 6020 FORMAT(/,&
             1X,'     CONSTANT VECTORS ( REAL, IMAGINARY )')
 6030 FORMAT(/,&
             1X,' **  OUTPUT  **',/)
 6040 FORMAT(1X,'     IERR(ZBGMLU) =',I5)
 6050 FORMAT(1X,'     IERR =',I5,/)
 6060 FORMAT(1X,'     SOLUTION ( REAL, IMAGINARY )')
      END
```

(d) 出力結果

```
***  ZBGMMS  ***

 **  INPUT  **

     N =  4
     M =  4

     COEFFICIENT MATRIX ( REAL, IMAGINARY )
      ( 4.0000, 2.0000) ( 3.0000, 9.0000) ( 4.0000, 1.0000) ( 7.0000, 9.0000)
      ( 6.0000, 7.0000) ( 0.0000, 4.0000) ( 4.0000, 7.0000) ( 2.0000, 5.0000)
      ( 9.0000, 3.0000) ( 6.0000, 2.0000) ( 9.0000, 5.0000) ( 8.0000, 5.0000)
      ( 1.0000, 5.0000) ( 7.0000, 9.0000) ( 3.0000, 5.0000) ( 2.0000, 4.0000)

     CONSTANT VECTORS ( REAL, IMAGINARY )
      ( 1.0000, 0.0000) ( 0.0000, 0.0000) ( 0.0000, 0.0000) ( 0.0000, 0.0000)
      ( 0.0000, 0.0000) ( 1.0000, 0.0000) ( 0.0000, 0.0000) ( 0.0000, 0.0000)
      ( 0.0000, 0.0000) ( 0.0000, 0.0000) ( 1.0000, 0.0000) ( 0.0000, 0.0000)
      ( 0.0000, 0.0000) ( 0.0000, 0.0000) ( 0.0000, 0.0000) ( 1.0000, 0.0000)

 **  OUTPUT  **

     IERR =    0

     SOLUTION ( REAL, IMAGINARY )
      ( 0.0133,-0.0730) ( 0.1814,-0.2467) (-0.1840, 0.1782) (-0.1039,-0.0560)
      (-0.0178,-0.0189) (-0.0680,-0.0696) (-0.0128, 0.1001) ( 0.0415,-0.0657)
      (-0.0353, 0.1382) (-0.0585, 0.1700) ( 0.1333,-0.2410) ( 0.1314, 0.0191)
      ( 0.0494,-0.0686) (-0.0096, 0.1300) ( 0.0885,-0.0709) (-0.0462, 0.0662)
```

## 2.3.7 ZBGMDI, CBGMDI
## 複素行列の行列式と逆行列

(1) **機 能**

ガウス法またはクラウト法で LU 分解された複素行列 $A$ = (AR, AI) (2 次元配列型) の行列式と逆行列を求める.

(2) **使用法**

倍精度サブルーチン:

CALL ZBGMDI (AR, AI, LNA, N, IPVT, DET, ISW, W1, IERR)

単精度サブルーチン:

CALL CBGMDI (AR, AI, LNA, N, IPVT, DET, ISW, W1, IERR)

(3) **引 数**

D:倍精度実数型　Z:倍精度複素数型
R:単精度実数型　C:単精度複素数型

I: {32 ビット整数版では INTEGER(4) / 64 ビット整数版では INTEGER(8)}

| 項番 | 引数名 | 型 | 大きさ | 入出力 | 内　容 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | AR | {D / R} | LNA, N | 入 力 | LU 分解後の複素行列 $A$ の実部 (2 次元配列型) (注意事項 (a), (b) 参照) |
| | | | | 出 力 | 行列 $A$ の逆行列の実部 |
| 2 | AI | {D / R} | LNA, N | 入 力 | LU 分解後の複素行列 $A$ の虚部 (2 次元配列型) (注意事項 (a), (b) 参照) |
| | | | | 出 力 | 行列 $A$ の逆行列の虚部 |
| 3 | LNA | I | 1 | 入 力 | 配列 AR, AI の整合寸法 |
| 4 | N | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の次数 |
| 5 | IPVT | I | N | 入 力 | ピボッティング情報 IPVT(i) :<br>LU 分解の i 段目の処理において行 i と交換した行の番号 (注意事項 (c) 参照) |
| 6 | DET | {D / R} | 3 | 出 力 | 行列 $A$ の行列式の値 (注意事項 (d) 参照) |
| 7 | ISW | I | 1 | 入 力 | 処理スイッチ<br>ISW>0:行列式の値を求める.<br>ISW=0:行列式の値と逆行列を求める.<br>ISW<0:逆行列を求める. |
| 8 | W1 | {D / R} | 2 × N | ワーク | 作業領域 |
| 9 | IERR | I | 1 | 出 力 | エラーインディケータ |

(4) **制限条件**

(a) $0 < \mathrm{N} \leq \mathrm{LNA}$

(5) **エラーインディケータ**

| IERR の値 | 意　　　味 | 処　理　内　容 |
|---|---|---|
| 0 | 正常終了. | |
| 1000 | N = 1 であった. | $\mathrm{DET}(1) \leftarrow \mathrm{AR}(1,1)$<br>$\mathrm{DET}(2) \leftarrow \mathrm{AI}(1,1)$<br>$\mathrm{DET}(3) \leftarrow 0.0$<br>$\mathrm{AR}(1,1) \leftarrow \mathrm{AR}(1,1)/\{\mathrm{AR}(1,1)^2 + \mathrm{AI}(1,1)^2\}$<br>$\mathrm{AI}(1,1) \leftarrow -\mathrm{AI}(1,1)/\{\mathrm{AR}(1,1)^2 + \mathrm{AI}(1,1)^2\}$<br>とする. |
| 3000 | 制限条件 (a) を満足しなかった. | 処理を打ち切る. |

(6) **注意事項**

(a) このサブルーチンを使用するには, 係数行列 $A$ を LU 分解しておく必要がある. 分解は 2.3.3 $\left\{\begin{matrix}\mathrm{ZBGMLU}\\ \mathrm{CBGMLU}\end{matrix}\right\}$, 2.3.4 $\left\{\begin{matrix}\mathrm{ZBGMLC}\\ \mathrm{CBGMLC}\end{matrix}\right\}$, 2.3.2 $\left\{\begin{matrix}\mathrm{ZBGMSL}\\ \mathrm{CBGMSL}\end{matrix}\right\}$のいずれかで行えばよい.

(b) 配列 AR, AI には, 下三角部分に単位下三角行列 $L$ が符号をかえて, 上三角部分に上三角行列 $U$ が格納されていなければならない. ただし, 行列 $L$ の対角成分は常に 1.0 であるので, 配列 AR, AI には格納されていなくてよい. また, $U$ の対角成分は, その逆数が格納されていなければならない (2.3.2 図 2−4 参照).

(c) IPVT には, LU 分解時に行った部分軸選択 (partial pivoting) についての情報が格納されていなければならない. この情報は, 2.3.3 $\left\{\begin{matrix}\mathrm{ZBGMLU}\\ \mathrm{CBGMLU}\end{matrix}\right\}$, 2.3.4 $\left\{\begin{matrix}\mathrm{ZBGMLC}\\ \mathrm{CBGMLC}\end{matrix}\right\}$, 2.3.2 $\left\{\begin{matrix}\mathrm{ZBGMSL}\\ \mathrm{CBGMSL}\end{matrix}\right\}$によって与えられる.

(d) 行列式の値は次の式によって与えられる.
$\Re\{det(A)\} = \mathrm{DET}(1) \times 10^{\mathrm{DET}(3)}$
$\Im\{det(A)\} = \mathrm{DET}(2) \times 10^{\mathrm{DET}(3)}$
この時, $1.0 \leq |\mathrm{DET}(1)| + |\mathrm{DET}(2)| < 10.0$ となるようにスケーリングされている. ここで $\Re, \Im$ はそれぞれ複素数の実部, 虚部を取り出すことを意味している.

(e) **行列の次数が 100 以下など十分に小さい場合や, 逆行列そのものが必要である場合を除いて, 逆行列を計算すべきではない.** 数値計算では多くの場合, 逆行列は, $A^{-1}\boldsymbol{b}$ や $A^{-1}B$ といった形式で現れるが, これらはそれぞれ, ベクトル $\boldsymbol{x}$ についての連立 1 次方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$, 行列 $X$ についての多重右辺連立 1 次方程式 $AX = B$ として連立 1 次方程式を解いて計算すべきである. 数学的には, 逆行列を求めて逆行列とベクトルの積や逆行列と行列の積を計算することと前述のような連立 1 次方程式を解くことは同じであるが, 数値計算上は一般に, 逆行列による求解は計算効率も悪く, 計算精度も劣る.

## 2.3.8 ZBGMLX, CBGMLX
## 連立 1 次方程式の解の改良 (複素行列)

(1) **機 能**

複素行列 $A$ (2 次元配列型) を係数行列とする連立 1 次方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ の解を反復法により改良する.

(2) **使用法**

倍精度サブルーチン:

CALL ZBGMLX (AR, AI, LNA, N, ALR, ALI, BR, BI, XR, XI, ITOL, NIT, IPVT, W1, IERR)

単精度サブルーチン:

CALL CBGMLX (AR, AI, LNA, N, ALR, ALI, BR, BI, XR, XI, ITOL, NIT, IPVT, W1, IERR)

(3) **引 数**

D:倍精度実数型　Z:倍精度複素数型
R:単精度実数型　C:単精度複素数型
I: 32 ビット整数版では INTEGER(4) / 64 ビット整数版では INTEGER(8)

| 項番 | 引数名 | 型 | 大きさ | 入出力 | 内　容 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | AR | {D, R} | LNA, N | 入 力 | 係数行列 $A$ の実部 (複素行列, 2 次元配列型) |
| 2 | AI | {D, R} | LNA, N | 入 力 | 係数行列 $A$ の虚部 (複素行列, 2 次元配列型) |
| 3 | LNA | I | 1 | 入 力 | 配列 AR, AI, ALR, ALI の整合寸法 |
| 4 | N | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の次数 |
| 5 | ALR | {D, R} | LNA, N | 入 力 | LU 分解後の係数行列 $A$ の実部 (注意事項 (a) 参照) |
| 6 | ALI | {D, R} | LNA, N | 入 力 | LU 分解後の係数行列 $A$ の虚部 (注意事項 (a) 参照) |
| 7 | BR | {D, R} | N | 入 力 | 定数ベクトル $\boldsymbol{b}$の実部 |
| 8 | BI | {D, R} | N | 入 力 | 定数ベクトル $\boldsymbol{b}$の虚部 |
| 9 | XR | {D, R} | N | 入 力 | 近似解$\boldsymbol{x}$の実部 |
| | | | | 出 力 | 反復改良された解$\boldsymbol{x}$の実部 |
| 10 | XI | {D, R} | N | 入 力 | 近似解$\boldsymbol{x}$の虚部 |
| | | | | 出 力 | 反復改良された解$\boldsymbol{x}$の虚部 |
| 11 | ITOL | I | 1 | 入 力 | 反復改良したい桁数 (注意事項 (b) 参照) |
| | | | | 出 力 | 反復改良された桁数の近似数 (注意事項 (c) 参照) |
| 12 | NIT | I | 1 | 入 力 | 最大反復回数 (注意事項 (d) 参照) |
| 13 | IPVT | I | N | 入 力 | ピボッティング情報 (注意事項 (a) 参照) |
| 14 | W1 | {D, R} | $3 \times$ N | ワーク | 作業領域 |
| 15 | IERR | I | 1 | 出 力 | エラーインディケータ |

(4) **制限条件**

(a) $0 < \mathrm{N} \leq \mathrm{LNA}$

(5) **エラーインディケータ**

| IERR の値 | 意　　　　味 | 処　理　内　容 |
|---|---|---|
| 0 | 正常終了. | |
| 1000 | N = 1 であった. | 解は改良されない. |
| 3000 | 制限条件 (a) を満足しなかった. | 処理を打ち切る. |
| 5000 | 最大反復回数以内で収束しなかった. | ITOL の出力値を計算し, 処理を打ち切る. |
| 6000 | 解を改良できなかった. | |

(6) **注意事項**

(a) このサブルーチンは, 2.3.2 $\left\{\begin{array}{c}\text{ZBGMSL}\\\text{CBGMSL}\end{array}\right\}$ または 2.3.5 $\left\{\begin{array}{c}\text{ZBGMLS}\\\text{CBGMLS}\end{array}\right\}$ によって得られた解を, さらに改良するものである. 従って, 入力として 2.3.2 $\left\{\begin{array}{c}\text{ZBGMSL}\\\text{CBGMSL}\end{array}\right\}$, 2.3.3 $\left\{\begin{array}{c}\text{ZBGMLU}\\\text{CBGMLU}\end{array}\right\}$ または 2.3.4 $\left\{\begin{array}{c}\text{ZBGMLC}\\\text{CBGMLC}\end{array}\right\}$ によって分解された係数行列 $A$ と, その時のピボッティング情報を与えなければならない.

(b) 解の改良は, 解の上位 ITOL 桁が修正されなくなるまで反復される. ただし, 以下の条件を満たす場合は, 解の修正が下位 1 ビット以下になるまで反復される.
ITOL $\leq 0$ または ITOL $\geq -$ LOG10 $(2 \times \varepsilon)$ ($\varepsilon$ : 誤差判定のための単位)

(c) 反復回数以内で, 要求された桁数が収束しなかった場合, 修正されなくなった桁数の近似値が ITOL に返される.

(d) NIT の入力値が 0 以下の場合, 既定値として 40 がとられる.

## 2.4 複素行列 (2次元配列型) (複素引数型)

### 2.4.1 ZBGNSM, CBGNSM
### 多重右辺連立1次方程式 (複素行列)

(1) **機 能**

複素行列 $A$ (2次元配列型) を係数行列とする連立1次方程式 $A\boldsymbol{x_i} = \boldsymbol{b_i}(i = 1, 2, \cdots, m)$ を, ガウス法を用いて解く. すなわち, $n \times m$ 行列 $B$ を $B = [\boldsymbol{b_1}, \boldsymbol{b_2}, \cdots, \boldsymbol{b_m}]$ と定義した時, $[\boldsymbol{x_1}, \boldsymbol{x_2}, \cdots, \boldsymbol{x_m}] = A^{-1}B$ を求める.

(2) **使用法**

倍精度サブルーチン:

CALL ZBGNSM (AB, LNA, N, M, IPVT, IERR)

単精度サブルーチン:

CALL CBGNSM (AB, LNA, N, M, IPVT, IERR)

(3) **引 数**

D:倍精度実数型　Z:倍精度複素数型
R:単精度実数型　C:単精度複素数型
I: { 32 ビット整数版では INTEGER(4)
　　 64 ビット整数版では INTEGER(8) }

| 項番 | 引数名 | 型 | 大きさ | 入出力 | 内　　容 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | AB | {Z C} | 内容参照 | 入 力 | 係数行列 $A$ と右辺ベクトル $\boldsymbol{b_i}$ からなる行列 (複素行列, 2次元配列型) $[A, \boldsymbol{b_1}, \boldsymbol{b_2}, \ldots, \boldsymbol{b_m}]$ **大きさ:** (LNA, (N + M)) |
| | | | | 出 力 | 係数行列 $A$ の分解行列 $A'$ と解ベクトル $\boldsymbol{x_i}$ からなる行列 (複素行列, 2次元配列型) $[A', \boldsymbol{x_1}, \boldsymbol{x_2}, \ldots, \boldsymbol{x_m}]$ (注意事項 (a), (b) 参照) |
| 2 | LNA | I | 1 | 入 力 | 配列 AB の整合寸法 |
| 3 | N | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の次数 |
| 4 | M | I | 1 | 入 力 | 右辺ベクトルの数 $m$ |
| 5 | IPVT | I | N | 出 力 | ピボッティング情報 IPVT(i) : i 段目の処理において行 i と交換した行の番号 (注意事項 (a) 参照) |
| 6 | IERR | I | 1 | 出 力 | エラーインディケータ |

(4) **制限条件**

(a) $0 < \mathrm{N} \leq \mathrm{LNA}$

(b) $0 < \mathrm{M}$

(5) **エラーインディケータ**

| IERR の値 | 意　　味 | 処　理　内　容 |
|---|---|---|
| 0 | 正常終了. | |
| 1000 | N = 1 であった. | AB(1, N+i) ← AB(1, N+i)/AB(1, 1) ($i$ = 1, 2, ⋯, M) とする. |
| 2100 | 係数行列 A の LU 分解の処理において, 対角要素が 0 に近いものがあった. 分解行列を使って求解もしくは逆行列を計算する場合, 精度の良い結果が得られない場合がある. | 処理を続ける. |
| 3000 | 制限条件 (a) を満足しなかった. | 処理を打ち切る. |
| 3010 | 制限条件 (b) を満足しなかった. | |
| $4000 + i$ | 係数行列 $A$ の LU 分解の $i$ 段目の処理において, ピボットが 0.0 となった.<br>$A$ は特異である. | |

(6) **注意事項**

(a) このサブルーチンでは, 係数行列 $A$ の LU 分解時に, 部分軸選択 (partial pivoting) が行われている. 第 i 段目のピボット行が第 j 行 (i ≤ j) となった場合, IPVT(i) に j が格納される. また, このとき, 行列 $A$ の第 i 行と第 j 行の対応する列要素のうち, 第 1 列から第 n 列までの要素が実際に交換される.

(b) 配列 AB の下三角部分に単位下三角行列 $L$ が符号をかえて, 上三角部分に上三角行列 $U$ が格納される. ただし, $L$ の対角成分は常に 1.0 であるので, 配列 A には格納されない. また, $U$ の対角成分はその逆数が格納される (2.2.1 図 2−1 参照).

(7) **使用例**

(a) 問 題

$$\begin{bmatrix} 4+2i & 3+9i & 4+i & 7+9i \\ 6+7i & 4i & 4+7i & 2+5i \\ 9+3i & 6+2i & 9+5i & 8+5i \\ 1+5i & 7+9i & 3+5i & 2+4i \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_{1,1} & x_{1,2} & x_{1,3} & x_{1,4} \\ x_{2,1} & x_{2,2} & x_{2,3} & x_{2,4} \\ x_{3,1} & x_{3,2} & x_{3,3} & x_{3,4} \\ x_{4,1} & x_{4,2} & x_{4,3} & x_{4,4} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

を解く. ただし, $i = \sqrt{-1}$.

(b) 入力データ

係数行列 $A$ と定数ベクトル$\boldsymbol{b_1}, \cdots, \boldsymbol{b_4}$ からなる行列 AB, LNA=11, N=4, M=4

(c) 主プログラム

```
      PROGRAM ABGNSM
! *** EXAMPLE OF ZBGNSM ***
      IMPLICIT REAL(8) (A-H,O-Z)
      PARAMETER (LNA = 11)
      PARAMETER (LMA = 5)
      COMPLEX(8) AB
      DIMENSION AB(LNA,LNA+LMA),IPVT(LNA)
!
      READ (5,*) N
      READ (5,*) M
      WRITE (6,1000) N, M
      DO 10 I = 1, N
         READ (5,*) (AB(I,J),J=1,N)
         WRITE (6,1100) (AB(I,J),J=1,N)
   10 CONTINUE
      WRITE (6,1200)
      DO 20 I = 1, N
```

```
         READ (5,*) (AB(I,N+J),J=1,M)
         WRITE (6,1100) (AB(I,N+J),J=1,M)
   20 CONTINUE
      WRITE (6,1300)
      CALL ZBGNSM (AB,LNA,N,M,IPVT,IERR)
      WRITE (6,1400) 'ZBGNSM',IERR
      IF (IERR .GE. 3000) STOP
      WRITE (6,1600)
      DO 30 I = 1, N
         WRITE (6,1100) (AB(I,N+J),J=1,M)
   30 CONTINUE
      STOP
!
 1000 FORMAT(1X,/,/,&
             1X ,'***  ZBGNSM  ***',/,/,&
             1X,1X,'**  INPUT  **',/,/,&
             1X,5X,'N =',I3,/,&
             1X,5X,'M =',I3,/,&
             /,1X,5X,'COEFFICIENT MATRIX')
 1100 FORMAT(1X,6X,4('(',F8.4,',',F8.4,')'))
 1200 FORMAT(/,1X,5X,'CONSTANT VECTORS')
 1300 FORMAT(/,1X,1X,'**  OUTPUT  **',/)
 1400 FORMAT(1X,5X,'IERR (',A6,') =',I5)
 1600 FORMAT(/,1X,5X,'SOLUTION')
      END
```

(d) 出力結果

```
 ***  ZBGNSM  ***

  **  INPUT  **

      N =  4
      M =  4

      COEFFICIENT MATRIX
       (  4.0000,  2.0000)(  3.0000,  9.0000)(  4.0000,  1.0000)(  7.0000,  9.0000)
       (  6.0000,  7.0000)(  0.0000,  4.0000)(  4.0000,  7.0000)(  2.0000,  5.0000)
       (  9.0000,  3.0000)(  6.0000,  2.0000)(  9.0000,  5.0000)(  8.0000,  5.0000)
       (  1.0000,  5.0000)(  7.0000,  9.0000)(  3.0000,  5.0000)(  2.0000,  4.0000)

      CONSTANT VECTORS
       (  1.0000,  0.0000)(  0.0000,  0.0000)(  0.0000,  0.0000)(  0.0000,  0.0000)
       (  0.0000,  0.0000)(  1.0000,  0.0000)(  0.0000,  0.0000)(  0.0000,  0.0000)
       (  0.0000,  0.0000)(  0.0000,  0.0000)(  1.0000,  0.0000)(  0.0000,  0.0000)
       (  0.0000,  0.0000)(  0.0000,  0.0000)(  0.0000,  0.0000)(  1.0000,  0.0000)

  **  OUTPUT  **

      IERR (ZBGNSM) =    0

      SOLUTION
       (  0.0133, -0.0730)(  0.1814, -0.2467)( -0.1840,  0.1782)( -0.1039, -0.0560)
       ( -0.0178, -0.0189)( -0.0680, -0.0696)( -0.0128,  0.1001)(  0.0415, -0.0657)
       ( -0.0353,  0.1382)( -0.0585,  0.1700)(  0.1333, -0.2410)(  0.1314,  0.0191)
       (  0.0494, -0.0686)( -0.0096,  0.1300)(  0.0885, -0.0709)( -0.0462,  0.0662)
```

### 2.4.2 ZBGNSL, CBGNSL
### 連立 1 次方程式 (複素行列)

(1) **機 能**

複素行列 $A$ (2 次元配列型) を係数行列とする連立 1 次方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ をガウス法またはクラウト法を用いて解く.

(2) **使用法**

倍精度サブルーチン:

CALL ZBGNSL (A, LNA, N, B, IPVT, IERR)

単精度サブルーチン:

CALL CBGNSL (A, LNA, N, B, IPVT, IERR)

(3) **引 数**

D:倍精度実数型　Z:倍精度複素数型　I: {32 ビット整数版では INTEGER(4) / 64 ビット整数版では INTEGER(8)}
R:単精度実数型　C:単精度複素数型

| 項番 | 引数名 | 型 | 大きさ | 入出力 | 内　容 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | A | {Z / C} | LNA, N | 入 力 | 係数行列 $A$(複素行列, 2 次元配列型) |
| | | | | 出 力 | $A = LU$ と分解したときの上三角行列 $U$, および下三角行列 $L$ (注意事項 (b), (c) 参照) |
| 2 | LNA | I | 1 | 入 力 | 配列 A の整合寸法 |
| 3 | N | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の次数 |
| 4 | B | {Z / C} | N | 入 力 | 定数ベクトル $\boldsymbol{b}$ |
| | | | | 出 力 | 解 $\boldsymbol{x}$ |
| 5 | IPVT | I | N | 出 力 | ピボッティング情報 IPVT(i) :<br>i 段目の処理において行 i と交換した行の番号 (注意事項 (b) 参照) |
| 6 | IERR | I | 1 | 出 力 | エラーインディケータ |

(4) **制限条件**

(a) $0 < \mathrm{N} \leq \mathrm{LNA}$

## (5) エラーインディケータ

| IERR の値 | 意　　　　味 | 処　理　内　容 |
|---|---|---|
| 0 | 正常終了. | |
| 1000 | N = 1 であった. | B(1) ← B(1)/A(1, 1) とする. |
| 2100 | 係数行列 A の LU 分解の処理において, 対角要素が 0 に近いものがあった. 分解行列を使って求解もしくは逆行列を計算する場合, 精度の良い結果が得られない場合がある. | 処理を続ける. |
| 3000 | 制限条件 (a) を満足しなかった. | 処理を打ち切る. |
| $4000 + i$ | 係数行列 $A$ の LU 分解の $i$ 段目の処理において, ピボットが 0.0 となった.<br>$A$ は特異にである. | |

## (6) 注意事項

(a) 定数ベクトル$\boldsymbol{b}$のみが異なる複数の連立 1 次方程式を解く場合には, 直接サブルーチン 2.4.1 $\left\{\begin{matrix}\mathrm{ZBGNSM}\\ \mathrm{CBGNSM}\end{matrix}\right\}$ を用いて計算する方が効率よく解が求まる. ただし, 右辺ベクトル$\boldsymbol{b}$のすべてが前もって分からない場合など, 2.4.1 $\left\{\begin{matrix}\mathrm{ZBGNSM}\\ \mathrm{CBGNSM}\end{matrix}\right\}$を利用できない場合には, このサブルーチンを一度使用した後, 続けてサブルーチン 2.4.5 $\left\{\begin{matrix}\mathrm{ZBGNLS}\\ \mathrm{CBGNLS}\end{matrix}\right\}$を配列 B の内容のみを変えて使用すればよい. このようにすれば, 行列 $A$ の LU 分解が一度だけしか行われないため, 効率よく解が求まる.

(b) このサブルーチンでは, 係数行列 $A$ の LU 分解時に, 部分軸選択 (partial pivoting) が行われている. 第 i 段目のピボット行が第 j 行 (i ≤ j) となった場合, IPVT(i) に j が格納される. また, このとき, 行列 $A$ の第 i 行と第 j 行の対応する列要素のうち, 第 1 列から第 n 列までの要素が実際に交換される.

(c) 配列 A の下三角部分に単位下三角行列 $L$ が符号をかえて, 上三角部分に上三角行列 $U$ が格納される. ただし, $L$ の対角成分は常に 1.0 であるので, 配列 A には格納されない. また, $U$ の対角成分はその逆数が格納される (2.2.1 図 2−1 参照).

(7) **使用例**

(a) 問 題

$$\begin{bmatrix} 5+8i & 7+i & 6+3i & 1+2i \\ 1+i & 9+5i & 4+i & 5 \\ 4i & 3+3i & 4+2i & 6+9i \\ 7+8i & 6 & 7+6i & 10+4i \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3+20i \\ -6+7i \\ -6i \\ 13i \end{bmatrix}$$

を解く.

(b) 入力データ

係数行列 $A$, LNA $= 11$, N $= 4$, 定数ベクトル$\boldsymbol{b}$

(c) 主プログラム

```
      PROGRAM ABGNSL
!     *** EXAMPLE OF ZBGNLC,ZBGNLS ***
      IMPLICIT REAL(8) (A-H,O-Z)
      PARAMETER (LNA = 11,LNW = 22)
      COMPLEX(8) A(LNA,LNA),B(LNA),W1(LNW)
      DIMENSION IPVT(LNA)
!
      READ (5,*) N
      WRITE (6,1000) N
      DO 10 I = 1, N
         READ (5,*) (A(I,J),J=1,N)
         WRITE (6,1100) (A(I,J),J=1,N)
   10 CONTINUE
      READ (5,*) (B(I),I=1,N)
      WRITE (6,1200)
      DO 20 I = 1, N
         WRITE (6,1300) B(I)
   20 CONTINUE
      WRITE (6,1400)
      CALL ZBGNLC (A,LNA,N,IPVT,COND,W1,IERR)
      WRITE (6,1500) 'ZBGNLC',IERR
      IF (IERR .GE. 3000) STOP
      COND = 1.0D0/COND
      CALL ZBGNLS (A,LNA,N,B,IPVT,KERR)
      WRITE (6,1500) 'ZBGNLS',KERR
      WRITE (6,1600) COND
      WRITE (6,1700)
      DO 30 I = 1, N
         WRITE (6,1800) I,B(I)
   30 CONTINUE
      STOP
!
 1000 FORMAT (' ',/,/,' ***  ZBGNLC,ZBGNLS  ***',&
             /,2X,'**  INPUT  **',&
             /,6X,'N =',I3,&
             /,6X,'COEFFICIENT MATRIX ( REAL, IMAGINARY )')
 1100 FORMAT (6X,4(' (',F5.1,' ,',F5.1,' )'))
 1200 FORMAT (6X,'CONSTANT VECTOR ( REAL, IMAGINARY )')
 1300 FORMAT (6X,  ' (',F5.1,' ,',F5.1,' )')
 1400 FORMAT (2X,'**  OUTPUT  **')
 1500 FORMAT (6X,'IERR (',A6,') =',I5)
 1600 FORMAT (6X,'CONDITION NUMBER =',D18.10)
 1700 FORMAT (6X,'SOLUTION ( REAL, IMAGINARY )')
 1800 FORMAT (6X,'    X(',I2,') = (',D18.10,' ,',D18.10,' )')
      END
```

(d) 出力結果

```
 ***  ZBGNLC,ZBGNLS  ***
  **  INPUT  **
      N =  4
      COEFFICIENT MATRIX ( REAL, IMAGINARY )
       (  5.0 ,  8.0 ) (  7.0 ,  1.0 ) (  6.0 ,  3.0 ) (  1.0 ,  2.0 )
       (  1.0 ,  1.0 ) (  9.0 ,  5.0 ) (  4.0 ,  1.0 ) (  5.0 ,  0.0 )
       (  0.0 ,  4.0 ) (  3.0 ,  3.0 ) (  4.0 ,  2.0 ) (  6.0 ,  9.0 )
       (  7.0 ,  8.0 ) (  6.0 ,  0.0 ) (  7.0 ,  6.0 ) ( 10.0 ,  4.0 )
      CONSTANT VECTOR ( REAL, IMAGINARY )
       (  3.0 , 20.0 )
       ( -6.0 ,  7.0 )
       (  0.0 , -6.0 )
       (  0.0 , 13.0 )
  **  OUTPUT  **
      IERR (ZBGNLC) =    0
      IERR (ZBGNLS) =    0
      CONDITION NUMBER =  0.5807863993D+01
      SOLUTION ( REAL, IMAGINARY )
          X( 1) = (  0.1000000000D+01 ,  0.1000000000D+01 )
          X( 2) = ( -0.1665334537D-15 ,  0.1000000000D+01 )
          X( 3) = (  0.1000000000D+01 , -0.2775557562D-15 )
          X( 4) = ( -0.1000000000D+01 , -0.1000000000D+01 )
```

## 2.4.3 ZBGNLU, CBGNLU 複素行列の LU 分解

(1) **機 能**

複素行列 $A$ (2 次元配列型) をガウス法またはクラウト法を用いて LU 分解する.

(2) **使用法**

倍精度サブルーチン:

CALL ZBGNLU (A, LNA, N, IPVT, IERR)

単精度サブルーチン:

CALL CBGNLU (A, LNA, N, IPVT, IERR)

(3) **引 数**

D:倍精度実数型　Z:倍精度複素数型　I: $\left\{\begin{array}{l}\text{32 ビット整数版では INTEGER(4)}\\\text{64 ビット整数版では INTEGER(8)}\end{array}\right\}$
R:単精度実数型　C:単精度複素数型

| 項番 | 引数名 | 型 | 大きさ | 入出力 | 内 容 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | A | $\left\{\begin{array}{c}Z\\C\end{array}\right\}$ | LNA, N | 入 力 | 複素行列 $A$(2 次元配列型) |
| | | | | 出 力 | $A = LU$ と分解したときの上三角行列 $U$ および下三角行列 $L$(注意事項 (a), (b) 参照) |
| 2 | LNA | I | 1 | 入 力 | 配列 A の整合寸法 |
| 3 | N | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の次数 |
| 4 | IPVT | I | N | 出 力 | ピボッティング情報 IPVT(i) :<br>i 段目の処理において行 i と交換した行の番号 (注意事項 (b) 参照) |
| 5 | IERR | I | 1 | 出 力 | エラーインディケータ |

(4) **制限条件**

(a) $0 < \mathrm{N} \leq \mathrm{LNA}$

(5) **エラーインディケータ**

| IERR の値 | 意 味 | 処 理 内 容 |
|---|---|---|
| 0 | 正常終了. | |
| 1000 | N = 1 であった. | 配列 A の内容は変更されない. |
| 2100 | 係数行列 A の LU 分解の処理において, 対角要素が 0 に近いものがあった. 分解行列を使って求解もしくは逆行列を計算する場合, 精度の良い結果が得られない場合がある. | 処理を続ける. |
| 3000 | 制限条件 (a) を満足しなかった. | 処理を打ち切る. |
| $4000 + i$ | $i$ 段目の処理において, ピボットが 0.0 となった.<br>$A$ は特異である. | |

(6) **注意事項**

(a) 配列 A には, 下三角部分に単位下三角行列 $L$ が符号をかえて, 上三角部分に上三角行列 $U$ が格納される. ただし, 行列 $L$ の対角成分は常に 1.0 であるので, 配列 A には格納されない. また $U$ の対角成分は, その逆数が格納される (2.2.2 図 2−2 参照).

(b) このサブルーチンにおいては, 部分軸選択 (partial pivoting) が行われている. このときの情報は後続のサブルーチンで使用されるため, 配列 IPVT に格納される. 第 i 段目のピボット行が第 j 行 (i $\leq$ j) となった場合, IPVT(i) に j が格納される. また, このとき行列 $A$ の第 i 行と第 j 行の対応する列要素のうち, 第 1 列から第 n 列までの要素が実際に交換される.

## 2.4.4 ZBGNLC, CBGNLC 複素行列の LU 分解と条件数

(1) **機 能**

複素行列 $A$ (2 次元配列型) をガウス法またはクラウト法を用いて LU 分解し, 条件数を求める.

(2) **使用法**

倍精度サブルーチン:

CALL ZBGNLC (A, LNA, N, IPVT, COND, W1, IERR)

単精度サブルーチン:

CALL CBGNLC (A, LNA, N, IPVT, COND, W1, IERR)

(3) **引 数**

D:倍精度実数型　Z:倍精度複素数型　I: { 32 ビット整数版では INTEGER(4) / 64 ビット整数版では INTEGER(8) }
R:単精度実数型　C:単精度複素数型

| 項番 | 引数名 | 型 | 大きさ | 入出力 | 内　容 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | A | {Z / C} | LNA, N | 入 力 | 複素行列 $A$(2 次元配列型) |
| | | | | 出 力 | $A = LU$ と分解したときの上三角行列 $U$ および下三角行列 $L$(注意事項 (a), (b) 参照) |
| 2 | LNA | I | 1 | 入 力 | 配列 A の整合寸法 |
| 3 | N | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の次数 |
| 4 | IPVT | I | N | 出 力 | ピボッティング情報 IPVT(i) : i 段目の処理において行 i と交換した行の番号 (注意事項 (b) 参照) |
| 5 | COND | {D / R} | 1 | 出 力 | 条件数の逆数 |
| 6 | W1 | {Z / C} | N | ワーク | 作業領域 |
| 7 | IERR | I | 1 | 出 力 | エラーインディケータ |

(4) **制限条件**

(a) $0 < \mathrm{N} \leq \mathrm{LNA}$

(5) **エラーインディケータ**

| IERR の値 | 意　　　　　　味 | 処　理　内　容 |
|---|---|---|
| 0 | 正常終了. | |
| 1000 | N = 1 であった. | 配列 A の内容は変更されない.<br>COND ← 1.0 とする. |
| 2100 | 係数行列 A の LU 分解の処理において, 対角要素が 0 に近いものがあった. 分解行列を使って求解もしくは逆行列を計算する場合, 精度の良い結果が得られない場合がある. | 処理を続ける. |
| 3000 | 制限条件 (a) を満足しなかった. | 処理を打ち切る. |
| $4000 + i$ | $i$ 段目の処理において, ピボットが 0.0 となった.<br>$A$ は特異である. | 処理を打ち切る.<br>条件数は求められない. |

(6) **注意事項**

(a) 配列 A には, 下三角部分に単位下三角行列 $L$ が符号をかえて, 上三角部分に上三角行列 $U$ が格納される. ただし, 行列 $L$ の対角成分は常に 1.0 であるので, 配列 A には格納されない. また, $U$ の対角成分はその逆数が格納される (2.2.2 図 2−2 参照).

(b) このサブルーチンにおいては, 部分軸選択 (partial pivoting) が行われている. このときの情報は後続のサブルーチンで使用されるため, 配列 IPVT に格納される. 第 i 段目のピボット行が第 j 行 (i ≤ j) となった場合, IPVT(i) に j が格納される. また, このとき, 行列 $A$ の第 i 行と第 j 行の対応する列要素のうち, 第 1 列から第 n 列までの要素が実際に交換される.

(c) 条件数は $\|A\| \cdot \|A^{-1}\|$ で定義されるが, このサブルーチンで求められる値はその概算値である.

## 2.4.5 ZBGNLS, CBGNLS
## 連立 1 次方程式 (LU 分解後の複素行列)

(1) **機 能**

ガウス法またはクラウト法で LU 分解された複素行列 $A$ (2 次元配列型) を係数行列とする連立 1 次方程式 $LU\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ を解く.

(2) **使用法**

倍精度サブルーチン:

CALL ZBGNLS (A, LNA, N, B, IPVT, IERR)

単精度サブルーチン:

CALL CBGNLS (A, LNA, N, B, IPVT, IERR)

(3) **引 数**

D:倍精度実数型　Z:倍精度複素数型　I: {32 ビット整数版では INTEGER(4), 64 ビット整数版では INTEGER(8)}
R:単精度実数型　C:単精度複素数型

| 項番 | 引数名 | 型 | 大きさ | 入出力 | 内 容 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | A | {Z, C} | LNA, N | 入 力 | LU 分解後の係数行列 $A$(複素行列, 2 次元配列型)<br>(注意事項 (a), (b) 参照) |
| 2 | LNA | I | 1 | 入 力 | 配列 A の整合寸法 |
| 3 | N | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の次数 |
| 4 | B | {Z, C} | N | 入 力 | 定数ベクトル $\boldsymbol{b}$ |
| | | | | 出 力 | 解 $\boldsymbol{x}$ |
| 5 | IPVT | I | N | 入 力 | ピボッティング情報 IPVT(i) :<br>LU 分解の i 段目の処理において行 i と交換した行の番号 (注意事項 (c) 参照) |
| 6 | IERR | I | 1 | 出 力 | エラーインディケータ |

(4) **制限条件**

(a) $0 < \mathrm{N} \leq \mathrm{LNA}$

(5) **エラーインディケータ**

| IERR の値 | 意 味 | 処 理 内 容 |
|---|---|---|
| 0 | 正常終了. | |
| 1000 | N = 1 であった. | B(1) = B(1)/A(1, 1) とする. |
| 3000 | 制限条件 (a) を満足しなかった. | 処理を打ち切る. |

(6) **注意事項**

(a) このサブルーチンを使用するには, 係数行列 $A$ を LU 分解しておく必要がある. 通常はサブルーチン 2.4.3 $\left\{\begin{matrix}\text{ZBGNLU}\\\text{CBGNLU}\end{matrix}\right\}$ を使用して分解するが, 条件数も求めたい場合は 2.4.4 $\left\{\begin{matrix}\text{ZBGNLC}\\\text{CBGNLC}\end{matrix}\right\}$ を使用する. また, 2.4.2 $\left\{\begin{matrix}\text{ZBGNSL}\\\text{CBGNSL}\end{matrix}\right\}$ を使用して, 同一の係数行列 $A$ を持つ連立 1 次方程式をすでに解いている場合は, その出力として得られる LU 分解を利用することもできる. 定数ベクトル $b$ のみが異なる複数の連立 1 次方程式を解く場合には, 直接サブルーチン 2.4.6 $\left\{\begin{matrix}\text{ZBGNMS}\\\text{CBGNMS}\end{matrix}\right\}$を用いて計算する方が効率良く解が求まる.

(b) 配列 A には, 下三角部分に単位下三角行列 $L$ が符号をかえて, 上三角部分に上三角行列 $U$ が格納されていなければならない. ただし, 行列 $L$ の対角成分は常に 1.0 であるので, 配列 A には格納されていなくてよい. また, $U$ の対角成分はその逆数が格納されていなければならない (2.2.2 図 2−2 参照).

(c) IPVT には, LU 分解時に行った部分軸選択 (partial pivoting) についての情報が格納されていなければならない. この情報は 2.4.3 $\left\{\begin{matrix}\text{ZBGNLU}\\\text{CBGNLU}\end{matrix}\right\}$, 2.4.4 $\left\{\begin{matrix}\text{ZBGNLC}\\\text{CBGNLC}\end{matrix}\right\}$, 2.4.2 $\left\{\begin{matrix}\text{ZBGNSL}\\\text{CBGNSL}\end{matrix}\right\}$ によって与えられる.

## 2.4.6 ZBGNMS, CBGNMS 多重右辺連立 1 次方程式 (LU 分解後の複素行列)

(1) **機 能**

ガウス法またはクラウト法で LU 分解された複素行列 $A$ (2 次元配列型) を係数行列とする連立 1 次方程式 $LU\boldsymbol{x}_i = \boldsymbol{b}_i (i = 1, 2, \cdots, m)$ を解く． すなわち, $n \times m$ 行列 $B$ を $B = [\boldsymbol{b}_1, \boldsymbol{b}_2, \cdots, \boldsymbol{b}_m]$ と定義した時, $[\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \cdots, \boldsymbol{x}_m] = A^{-1}B$ を求める．

(2) **使用法**

倍精度サブルーチン:

CALL ZBGNMS (A, LNA, N, B, LNB, M, IPVT, IERR)

単精度サブルーチン:

CALL CBGNMS (A, LNA, N, B, LNB, M, IPVT, IERR)

(3) **引 数**

D:倍精度実数型　Z:倍精度複素数型　I: { 32 ビット整数版では INTEGER(4) / 64 ビット整数版では INTEGER(8) }
R:単精度実数型　C:単精度複素数型

| 項番 | 引数名 | 型 | 大きさ | 入出力 | 内容 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | A | {Z, C} | LNA, N | 入 力 | LU 分解後の係数行列 $A$(複素行列, 2 次元配列型) (注意事項 (a), (b) 参照) |
| 2 | LNA | I | 1 | 入 力 | 配列 A の整合寸法 |
| 3 | N | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の次数 |
| 4 | B | {Z, C} | LNB, M | 入 力 | 定数ベクトル $\boldsymbol{b}$ |
| | | | | 出 力 | 解$\boldsymbol{x}$ |
| 5 | LNB | I | 1 | 入 力 | 配列 B の整合寸法 |
| 6 | M | I | 1 | 入 力 | 行列 $B$ の次数 |
| 7 | IPVT | I | N | 入 力 | ピボッティング情報 IPVT(i) : LU 分解の i 段目の処理において行 i と交換した行の番号 (注意事項 (c) 参照) |
| 8 | IERR | I | 1 | 出 力 | エラーインディケータ |

(4) **制限条件**

(a) $0 < \mathrm{N} \leq \mathrm{LNA}, \mathrm{LNB}$

(b) $\mathrm{M} > 0$

(c) $0 < \mathrm{IPVT}(i) \leq \mathrm{N} \quad (i = 1, \ldots, \mathrm{N})$

(5) **エラーインディケータ**

| IERR の値 | 意　　　味 | 処　理　内　容 |
|---|---|---|
| 0 | 正常終了. | |
| 1000 | N = 1 であった. | $\mathrm{B}(1,i) \leftarrow \mathrm{B}(1,i)/\mathrm{A}(1,1)$<br>$(i=1,2,\cdots,\mathrm{M})$ とする. |
| 3000 | 制限条件 (a) を満足しなかった. | 処理を打ち切る. |
| 3010 | 制限条件 (b) を満足しなかった. | |
| 3020 | 制限条件 (c) を満足しなかった. | |

(6) **注意事項**

(a) このサブルーチンを使用するには, 係数行列 $A$ を LU 分解しておく必要がある. 通常はサブルーチン 2.4.3 $\left\{\begin{matrix}\text{ZBGNLU}\\\text{CBGNLU}\end{matrix}\right\}$ を使用して分解するが, 条件数も求めたい場合は 2.4.4 $\left\{\begin{matrix}\text{ZBGNLC}\\\text{CBGNLC}\end{matrix}\right\}$ を使用する. また, 2.4.2 $\left\{\begin{matrix}\text{ZBGNSL}\\\text{CBGNSL}\end{matrix}\right\}$ を使用して, 同一の係数行列 $A$ を持つ連立 1 次方程式をすでに解いている場合は, その出力として得られる LU 分解を利用することもできる.

(b) 配列 A には, 下三角部分に単位下三角行列 $L$ が符号をかえて, 上三角部分に上三角行列 $U$ が格納されていなければならない. ただし, 行列 $L$ の対角成分は常に 1.0 であるので, 配列 A には格納されていなくてよい. また, $U$ の対角成分はその逆数が格納されていなければならない (2.2.2 図 2−2 参照).

(c) IPVT には, LU 分解時に行った部分軸選択 (partial pivoting) についての情報が格納されていなければならない. この情報は 2.4.3 $\left\{\begin{matrix}\text{ZBGNLU}\\\text{CBGNLU}\end{matrix}\right\}$, 2.4.4 $\left\{\begin{matrix}\text{ZBGNLC}\\\text{CBGNLC}\end{matrix}\right\}$, 2.4.2 $\left\{\begin{matrix}\text{ZBGNSL}\\\text{CBGNSL}\end{matrix}\right\}$ によって与えられる.

(7) **使用例**

(a) 問 題

$$\begin{bmatrix} 4+2i & 3+9i & 4+i & 7+9i \\ 6+7i & 4i & 4+7i & 2+5i \\ 9+3i & 6+2i & 9+5i & 8+5i \\ 1+5i & 7+9i & 3+5i & 2+4i \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_{1,1} & x_{1,2} & x_{1,3} & x_{1,4} \\ x_{2,1} & x_{2,2} & x_{2,3} & x_{2,4} \\ x_{3,1} & x_{3,2} & x_{3,3} & x_{3,4} \\ x_{4,1} & x_{4,2} & x_{4,3} & x_{4,4} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

を解く.

(b) 入力データ

係数行列 $A$ の A と, 定数ベクトル$\boldsymbol{b_1}$, $\cdots$,$\boldsymbol{b_4}$からなる行列 B, LNA=11, LNB=11, N=4, M=4

(c) 主プログラム

```
      PROGRAM ABGNMS
! *** EXAMPLE OF ZBGNMS ***
      IMPLICIT NONE
      INTEGER LNA,LNB,LMB
      PARAMETER( LNA = 11, LNB = 11, LMB = 5 )
      INTEGER N,M,IPVT(LNA),IERR
      INTEGER I,J
      COMPLEX(8) A(LNA,LNA),B(LNB,LMB)
!
      DATA (A(1,J),J=1,4)&
      / (4.0D0,2.0D0),(3.0D0,9.0D0),(4.0D0,1.0D0),(7.0D0,9.0D0) /
      DATA (A(2,J),J=1,4)&
      / (6.0D0,7.0D0),(0.0D0,4.0D0),(4.0D0,7.0D0),(2.0D0,5.0D0) /
      DATA (A(3,J),J=1,4)&
      / (9.0D0,3.0D0),(6.0D0,2.0D0),(9.0D0,5.0D0),(8.0D0,5.0D0) /
      DATA (A(4,J),J=1,4)&
      / (1.0D0,5.0D0),(7.0D0,9.0D0),(3.0D0,5.0D0),(2.0D0,4.0D0) /
!
      N = 4
      M = 4
```

```
      DO 100 J=1,M
      DO 101 I=1,N
         B(I,J) = (0.0D0,0.0D0)
  101 CONTINUE
  100 CONTINUE
      DO 110 I=1,N
         B(I,I) = (1.0D0,0.0D0)
  110 CONTINUE
!
      WRITE(6,6000) N, M
      DO 120 I = 1, N
         WRITE(6,6010) (A(I,J),J=1,N)
  120 CONTINUE
      WRITE(6,6020)
      DO 130 I = 1, N
         WRITE(6,6010) (B(I,J),J=1,M)
  130 CONTINUE
!
      WRITE(6,6030)
      CALL ZBGNLU(A,LNA,N,IPVT,IERR)
      IF( IERR .GE. 3000 ) THEN
         WRITE(6,6040) IERR
         STOP
      ENDIF
      CALL ZBGNMS(A,LNA,N,B,LNB,M,IPVT,IERR)
      WRITE(6,6050) IERR
      IF( IERR .GE. 3000 ) STOP
      WRITE(6,6060)
      DO 140 I = 1, N
         WRITE(6,6010) (B(I,J),J=1,M)
  140 CONTINUE
      STOP
!
 6000 FORMAT(/,&
             1X,'***  ZBGNMS  ***',/,/,&
             1X,' **  INPUT  **',/,/,&
             1X,'     N =',I3,/,&
             1X,'     M =',I3,/,/,&
             1X,'     COEFFICIENT MATRIX ( REAL, IMAGINARY )')
 6010 FORMAT(1X,'     ',4(' (',F7.4,',',F7.4,')'))
 6020 FORMAT(/,&
             1X,'     CONSTANT VECTORS ( REAL, IMAGINARY )')
 6030 FORMAT(/,&
             1X,' **  OUTPUT  **',/)
 6040 FORMAT(1X,'     IERR(ZBGNLU) =',I5)
 6050 FORMAT(1X,'     IERR =',I5,/)
 6060 FORMAT(1X,'     SOLUTION ( REAL, IMAGINARY )')
      END
```

(d) 出力結果

```
***  ZBGNMS  ***

 **  INPUT  **

     N =  4
     M =  4

     COEFFICIENT MATRIX ( REAL, IMAGINARY )
      ( 4.0000, 2.0000) ( 3.0000, 9.0000) ( 4.0000, 1.0000) ( 7.0000, 9.0000)
      ( 6.0000, 7.0000) ( 0.0000, 4.0000) ( 4.0000, 7.0000) ( 2.0000, 5.0000)
      ( 9.0000, 3.0000) ( 6.0000, 2.0000) ( 9.0000, 5.0000) ( 8.0000, 5.0000)
      ( 1.0000, 5.0000) ( 7.0000, 9.0000) ( 3.0000, 5.0000) ( 2.0000, 4.0000)

     CONSTANT VECTORS ( REAL, IMAGINARY )
      ( 1.0000, 0.0000) ( 0.0000, 0.0000) ( 0.0000, 0.0000) ( 0.0000, 0.0000)
      ( 0.0000, 0.0000) ( 1.0000, 0.0000) ( 0.0000, 0.0000) ( 0.0000, 0.0000)
      ( 0.0000, 0.0000) ( 0.0000, 0.0000) ( 1.0000, 0.0000) ( 0.0000, 0.0000)
      ( 0.0000, 0.0000) ( 0.0000, 0.0000) ( 0.0000, 0.0000) ( 1.0000, 0.0000)

 **  OUTPUT  **

     IERR =    0

     SOLUTION ( REAL, IMAGINARY )
      ( 0.0133,-0.0730) ( 0.1814,-0.2467) (-0.1840, 0.1782) (-0.1039,-0.0560)
      (-0.0178,-0.0189) (-0.0680,-0.0696) (-0.0128, 0.1001) ( 0.0415,-0.0657)
      (-0.0353, 0.1382) (-0.0585, 0.1700) ( 0.1333,-0.2410) ( 0.1314, 0.0191)
      ( 0.0494,-0.0686) (-0.0096, 0.1300) ( 0.0885,-0.0709) (-0.0462, 0.0662)
```

## 2.4.7 ZBGNDI, CBGNDI 複素行列の行列式と逆行列

(1) **機 能**

ガウス法またはクラウト法で LU 分解された複素行列 $A$ (2 次元配列型) の行列式と逆行列を求める.

(2) **使用法**

倍精度サブルーチン:

CALL ZBGNDI (A, LNA, N, IPVT, CDET, DET, ISW, W1, IERR)

単精度サブルーチン:

CALL CBGNDI (A, LNA, N, IPVT, CDET, DET, ISW, W1, IERR)

(3) **引 数**

D:倍精度実数型 Z:倍精度複素数型 R:単精度実数型 C:単精度複素数型 I: {32 ビット整数版では INTEGER(4), 64 ビット整数版では INTEGER(8)}

| 項番 | 引数名 | 型 | 大きさ | 入出力 | 内 容 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | A | {Z, C} | LNA, N | 入 力 | LU 分解後の複素行列 $A$(2 次元配列型) (注意事項 (a), (b) 参照) |
| | | | | 出 力 | 行列 $A$ の逆行列 |
| 2 | LNA | I | 1 | 入 力 | 配列 A の整合寸法 |
| 3 | N | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の次数 |
| 4 | IPVT | I | N | 入 力 | ピボッティング情報 IPVT(i) :<br>LU 分解の i 段目の処理において行 i と交換した行の番号 (注意事項 (c) 参照) |
| 5 | CDET | {Z, C} | 1 | 出 力 | 行列 $A$ の行列式の値 (注意事項 (d) 参照) |
| 6 | DET | {D, R} | 1 | 出 力 | 行列 $A$ の行列式の値 (注意事項 (d) 参照) |
| 7 | ISW | I | 1 | 入 力 | 処理スイッチ<br>ISW>0:行列式の値を求める.<br>ISW=0:行列式の値と逆行列を求める.<br>ISW<0:逆行列を求める. |
| 8 | W1 | {Z, C} | N | ワーク | 作業領域 |
| 9 | IERR | I | 1 | 出 力 | エラーインディケータ |

(4) **制限条件**

(a) $0 < \mathrm{N} \le \mathrm{LNA}$

(5) **エラーインディケータ**

| IERR の値 | 意　　　　味 | 処　理　内　容 |
|---|---|---|
| 0 | 正常終了. | |
| 1000 | N = 1 であった. | CDET ← A(1, 1)<br>DET ← 0.0<br>A(1, 1) ← 1.0/A(1, 1) とする. |
| 3000 | 制限条件 (a) を満足しなかった. | 処理を打ち切る. |

(6) **注意事項**

(a) このサブルーチンを使用するには, 係数行列 $A$ を LU 分解しておく必要がある.
分解は 2.4.3 $\begin{Bmatrix}\text{ZBGNLU}\\ \text{CBGNLU}\end{Bmatrix}$, 2.4.4 $\begin{Bmatrix}\text{ZBGNLC}\\ \text{CBGNLC}\end{Bmatrix}$, 2.4.2 $\begin{Bmatrix}\text{ZBGNSL}\\ \text{CBGNSL}\end{Bmatrix}$ のいずれかで行えばよい.

(b) 配列 A には, 下三角部分に単位下三角行列 $L$ が符号をかえて, 上三角部分に上三角行列 $U$ が格納されていなければならない. ただし, 行列 $L$ の対角成分は常に 1.0 であるので, 配列 A には格納されていなくてよい. また, $U$ の対角成分はその逆数が格納されていなければならない (2.2.2 図 2–2 参照).

(c) IPVT には, LU 分解時に行った部分軸選択 (partial pivoting) についての情報が格納されていなければならない. この情報は 2.4.3 $\begin{Bmatrix}\text{ZBGNLU}\\ \text{CBGNLU}\end{Bmatrix}$, 2.4.4 $\begin{Bmatrix}\text{ZBGNLC}\\ \text{CBGNLC}\end{Bmatrix}$, 2.4.2 $\begin{Bmatrix}\text{ZBGNSL}\\ \text{CBGNSL}\end{Bmatrix}$ によって与えられる.

(d) 行列式の値は次の式によって与えられる.
$det(A) = \text{CDET} \times 10^{\text{DET}}$
この時, $1.0 \le |\Re\{\text{CDET}\}| + |\Im\{\text{CDET}\}| < 10.0$ となるようにスケーリングされている. ここで $\Re, \Im$ はそれぞれ複素数の実部, 虚部を取り出すことを意味している.

(e) **行列の次数が 100 以下など十分に小さい場合や, 逆行列そのものが必要である場合を除いて, 逆行列を計算すべきではない.** 数値計算では多くの場合, 逆行列は, $A^{-1}\boldsymbol{b}$ や $A^{-1}B$ といった形式で現れるが, これらはそれぞれ, ベクトル $\boldsymbol{x}$ についての連立 1 次方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$, 行列 $X$ についての多重右辺連立 1 次方程式 $AX = B$ として連立 1 次方程式を解いて計算すべきである. 数学的には, 逆行列を求めて逆行列とベクトルの積や逆行列と行列の積を計算することと前述のような連立 1 次方程式を解くことは同じであるが, 数値計算上は一般に, 逆行列による求解は計算効率も悪く, 計算精度も劣る.

### 2.4.8 ZBGNLX, CBGNLX
### 連立 1 次方程式の解の改良 (複素行列)

(1) **機 能**

複素行列 $A$ (2 次元配列型) を 係数行列とする連立 1 次方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ の解を反復法により改良する.

(2) **使用法**

倍精度サブルーチン:

CALL ZBGNLX (A, LNA, N, ALU, B, X, ITOL, NIT, IPVT, W1, IERR)

単精度サブルーチン:

CALL CBGNLX (A, LNA, N, ALU, B, X, ITOL, NIT, IPVT, W1, IERR)

(3) **引 数**

D:倍精度実数型　Z:倍精度複素数型
R:単精度実数型　C:単精度複素数型

I: { 32 ビット整数版では INTEGER(4)
64 ビット整数版では INTEGER(8) }

| 項番 | 引数名 | 型 | 大きさ | 入出力 | 内　容 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | A | {Z, C} | LNA, N | 入 力 | 係数行列 $A$(複素行列, 2 次元配列型) |
| 2 | LNA | I | 1 | 入 力 | 配列 A, ALU の整合寸法 |
| 3 | N | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の次数 |
| 4 | ALU | {Z, C} | LNA, N | 入 力 | LU 分解後の係数行列 $A$(注意事項 (a) 参照) |
| 5 | B | {Z, C} | N | 入 力 | 定数ベクトル$\boldsymbol{b}$ |
| 6 | X | {Z, C} | N | 入 力 | 近似解$\boldsymbol{x}$ |
| | | | | 出 力 | 反復改良された解$\boldsymbol{x}$ |
| 7 | ITOL | I | 1 | 入 力 | 改良したい桁数 (注意事項 (b) 参照) |
| | | | | 出 力 | 改良された桁数の近似数 (注意事項 (c) 参照) |
| 8 | NIT | I | 1 | 入 力 | 最大反復回数 (注意事項 (d) 参照) |
| 9 | IPVT | I | N | 入 力 | ピボッティング情報 (注意事項 (a) 参照) |
| 10 | W1 | {Z, C} | N | ワーク | 作業領域 |
| 11 | IERR | I | 1 | 出 力 | エラーインディケータ |

(4) **制限条件**

(a) $0 < \mathrm{N} \leq \mathrm{LNA}$

(5) **エラーインディケータ**

| IERR の値 | 意　　　　　味 | 処　理　内　容 |
|---|---|---|
| 0 | 正常終了. | |
| 1000 | N = 1 であった. | 解は改良されない. |
| 3000 | 制限条件 (a) を満足しなかった. | 処理を打ち切る. |
| 5000 | 最大反復回数以内で収束しなかった. | ITOL の出力値を計算し, 処理を打ち切る. |
| 6000 | 解を改良できなかった. | |

(6) **注意事項**

(a) このサブルーチンは, 2.4.2 $\left\{\begin{array}{c}\mathrm{ZBGNSL}\\ \mathrm{CBGNSL}\end{array}\right\}$ または 2.4.5 $\left\{\begin{array}{c}\mathrm{ZBGNLS}\\ \mathrm{CBGNLS}\end{array}\right\}$ によって得られた解を, さらに改良するものである. 従って, 入力として 2.4.2 $\left\{\begin{array}{c}\mathrm{ZBGNSL}\\ \mathrm{CBGNSL}\end{array}\right\}$, 2.4.3 $\left\{\begin{array}{c}\mathrm{ZBGNLU}\\ \mathrm{CBGNLU}\end{array}\right\}$ または 2.4.4 $\left\{\begin{array}{c}\mathrm{ZBGNLC}\\ \mathrm{CBGNLC}\end{array}\right\}$ によって分解された係数行列 $A$ とその時得られたピボッティング情報を与えなければならない.

(b) 解の改良は, 解の上位 ITOL 桁が修正されなくなるまで反復される. ただし, 以下の条件を満たす場合は, 解の修正が下位 1 ビット以下になるまで反復される.
ITOL $\leq 0$ または ITOL $\geq -$ LOG10 $(2 \times \varepsilon)$ ($\varepsilon$ : 誤差判定のための単位)

(c) 反復回数以内で, 要求された桁数が収束しなかった場合, 修正されなくなった桁数の近似値が ITOL に返される.

(d) NIT の入力値が 0 以下の場合, 既定値として 40 がとられる.

## 2.5 正値対称行列 (2 次元配列型) (上三角型)

### 2.5.1 DBPDSL, RBPDSL
### 連立 1 次方程式 (正値対称行列)

(1) **機 能**

正値対称行列 $A$ (2 次元配列型) を係数行列とする連立 1 次方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ をコレスキー法を用いて解く.

(2) **使用法**

倍精度サブルーチン:

CALL DBPDSL (A, LNA, N, B, IERR)

単精度サブルーチン:

CALL RBPDSL (A, LNA, N, B, IERR)

(3) **引 数**

D:倍精度実数型　Z:倍精度複素数型　I: { 32 ビット整数版では INTEGER(4) / 64 ビット整数版では INTEGER(8) }
R:単精度実数型　C:単精度複素数型

| 項番 | 引数名 | 型 | 大きさ | 入出力 | 内　容 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | A | {D / R} | LNA, N | 入 力 | 係数行列 $A$(正値対称行列, 2 次元配列型, 上三角型) |
| | | | | 出 力 | $A = LL^T$ と分解した時の, 上三角行列 $L^T$ (注意事項 (b) 参照) |
| 2 | LNA | I | 1 | 入 力 | 配列 A の整合寸法 |
| 3 | N | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の次数 |
| 4 | B | {D / R} | N | 入 力 | 定数ベクトル $\boldsymbol{b}$ |
| | | | | 出 力 | 解 $\boldsymbol{x}$ |
| 5 | IERR | I | 1 | 出 力 | エラーインディケータ |

(4) **制限条件**

(a) $0 < \mathrm{N} \leq \mathrm{LNA}$

(5) **エラーインディケータ**

| IERR の値 | 意　味 | 処 理 内 容 |
|---|---|---|
| 0 | 正常終了. | |
| 1000 | N = 1 であった. | $\mathrm{A}(1,1) \leftarrow \sqrt{\mathrm{A}(1,1)}$<br>$\mathrm{B}(1) \leftarrow \mathrm{B}(1)/\mathrm{A}(1,1)$<br>とする. |
| 2100 | 係数行列 A の $\mathrm{LL^T}$ 分解の処理において, 対角要素が 0 に近いものがあった. 分解行列を使って求解もしくは逆行列を計算する場合, 精度の良い結果が得られない場合がある. | 処理を続ける. |

| IERR の値 | 意　　　　味 | 処　理　内　容 |
|---|---|---|
| 3000 | 制限条件 (a) を満足しなかった. | 処理を打ち切る. |
| $4000+i$ | 係数行列 $A$ の $\mathrm{LL^T}$ 分解の $i$ 段目の処理において, 対角要素が 0.0 以下となった.<br>$A$ は特異である. | |

(6) **注意事項**

(a) 定数ベクトル$\boldsymbol{b}$のみが異なる複数の連立 1 次方程式を解く場合には, このサブルーチンを一度呼び出した後, 続けて 2.5.4 $\left\{\begin{matrix}\text{DBPDLS}\\ \text{RBPDLS}\end{matrix}\right\}$を配列 B の内容のみを変えて呼び出せばよい. このようにすれば, 行列 $A$ の $\mathrm{LL^T}$ 分解が一度だけしか行われないため, 演算効率よく解が求まる.

(b) 配列 A の上三角部分に上三角行列 $L^T$ が格納される. 下三角行列 $L$ は $L^T$ より算出されるので, 配列 A には格納されない. このサブルーチンは, 配列 A の上三角部分のみを使用する.

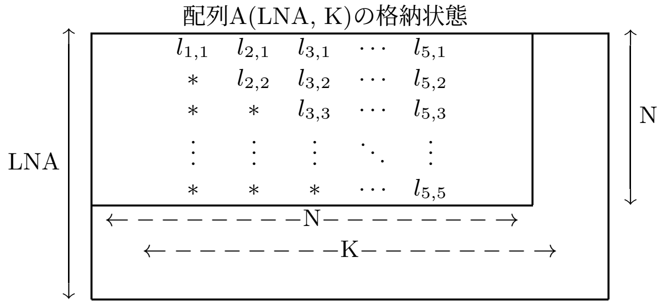
図 2−5　行列 $L^T$ の格納状態

行列 $L^T$

$$\begin{bmatrix} l_{1,1} & l_{2,1} & l_{3,1} & \cdots & l_{5,1} \\ 0.0 & l_{2,2} & l_{3,2} & \cdots & l_{5,2} \\ 0.0 & 0.0 & l_{3,3} & \cdots & l_{5,3} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0.0 & 0.0 & 0.0 & \cdots & l_{5,5} \end{bmatrix}$$

$\Downarrow$

配列A(LNA, K)の格納状態




**備　考**

a.　LNA $\geq$ N, N $\leq$ K を満たさなければならない.

b.　$*$ に対応する入力時の値は保証されない.

(7) **使用例**

(a) 問 題

$$\begin{bmatrix} 5 & 7 & 6 & 5 \\ 7 & 10 & 8 & 7 \\ 6 & 8 & 10 & 9 \\ 5 & 7 & 9 & 10 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 23 \\ 32 \\ 33 \\ 31 \end{bmatrix}$$

を解く.

(b) 入力データ

係数行列 $A$, LNA $=$ 11, N $=$ 4, 定数ベクトル$\boldsymbol{b}$

(c) 主プログラム

```
      PROGRAM BBPDSL
! *** EXAMPLE OF DBPDSL ***
      IMPLICIT REAL(8) (A-H,O-Z)
      PARAMETER (LNA = 11)
      DIMENSION A(LNA,LNA),B(LNA)
!
      READ (5,*) N
      WRITE (6,1000) N
      DO 10 I = 1, N
         READ (5,*) (A(I,J),J=I,N)
         WRITE (6,1100) (A(J,I),J=1,I-1),(A(I,J),J=I,N)
   10 CONTINUE
      READ (5,*) (B(I),I=1,N)
      WRITE (6,1200) (B(I),I=1,N)
      WRITE (6,1300)
      CALL DBPDSL (A,LNA,N,B,IERR)
      WRITE (6,1400) 'DBPDSL',IERR
      IF (IERR .GE. 3000) STOP
      WRITE (6,1500) (I,B(I),I=1,N)
      STOP
!
 1000 FORMAT(' ',/,/,&
             ' ***  DBPDSL  ***',/,&
             2X,'**  INPUT  **',/,&
             6X,'N =',I3,/,&
             6X,'COEFFICIENT MATRIX')
 1100 FORMAT(7X,10(G11.4))
 1200 FORMAT(6X,'CONSTANT VECTOR',/,(7X,F10.4))
 1300 FORMAT(2X,'**  OUTPUT  **')
 1400 FORMAT(6X,'IERR (',A6,') =',I5)
 1500 FORMAT(6X,'SOLUTION',/,(8X,'X(',I2,') =',D18.10))
      END
```

(d) 出力結果

```
***  DBPDSL  ***
 **  INPUT  **
     N =  4
     COEFFICIENT MATRIX
        5.000      7.000      6.000      5.000
        7.000      10.00      8.000      7.000
        6.000      8.000      10.00      9.000
        5.000      7.000      9.000      10.00
     CONSTANT VECTOR
         23.0000
         32.0000
         33.0000
         31.0000
 **  OUTPUT  **
     IERR (DBPDSL) =    0
     SOLUTION
       X( 1) =  0.1000000000D+01
       X( 2) =  0.1000000000D+01
       X( 3) =  0.1000000000D+01
       X( 4) =  0.1000000000D+01
```

### 2.5.2 DBPDUU, RBPDUU 正値対称行列の $\mathrm{LL^T}$ 分解

(1) **機 能**

正値対称行列 $A$(2 次元配列型)(上三角型) をコレスキー法を用いて $\mathrm{LL^T}$ 分解する.

(2) **使用法**

倍精度サブルーチン:

CALL DBPDUU (A, LNA, N, IERR)

単精度サブルーチン:

CALL RBPDUU (A, LNA, N, IERR)

(3) **引 数**

D:倍精度実数型　Z:倍精度複素数型　I: {32 ビット整数版では INTEGER(4) / 64 ビット整数版では INTEGER(8)}
R:単精度実数型　C:単精度複素数型

| 項番 | 引数名 | 型 | 大きさ | 入出力 | 内　　容 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | A | {D / R} | LNA, N | 入 力 | 正値対称行列 $A$(2 次元配列型)(上三角型) |
| | | | | 出 力 | $A = LL^T$ と分解した時の, 上三角行列 $L^T$ (注意事項 (a) 参照) |
| 2 | LNA | I | 1 | 入 力 | 配列 A の整合寸法 |
| 3 | N | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の次数 |
| 4 | IERR | I | 1 | 出 力 | エラーインディケータ |

(4) **制限条件**

(a) $0 < \mathrm{N} \leq \mathrm{LNA}$

(5) **エラーインディケータ**

| IERR の値 | 意　　味 | 処 理 内 容 |
|---|---|---|
| 0 | 正常終了. | |
| 1000 | $\mathrm{N} = 1$ であった. | $\mathrm{A(1,1)} \leftarrow \sqrt{\mathrm{A(1,1)}}$ とする. |
| 2100 | 係数行列 A の $\mathrm{LL^T}$ 分解の処理において, 対角要素が 0 に近いものがあった. 分解行列を使って求解もしくは逆行列を計算する場合, 精度の良い結果が得られない場合がある. | 処理を続ける. |
| 3000 | 制限条件 (a) を満足しなかった. | 処理を打ち切る. |
| $4000 + i$ | $i$ 段目の処理において, 対角要素が 0.0 以下となった.<br>$A$ は特異である. | |

(6) **注意事項**

(a) 配列 A には, 上三角部分に上三角行列 $L^T$ が格納される. 下三角行列 $L$ は $L^T$ より算出されるので, 配列 A には格納されない. このサブルーチンは配列 A の上三角部分のみを使用する (2.5.1 図 2−5 参照).

### 2.5.3 DBPDUC, RBPDUC<br>正値対称行列の $\mathrm{LL^T}$ 分解と条件数

(1) **機 能**

正値対称行列 $A$(2 次元配列型)(上三角型) をコレスキー法を用いて $\mathrm{LL^T}$ 分解し, 条件数を求める.

(2) **使用法**

倍精度サブルーチン:

CALL DBPDUC (A, LNA, N, COND, W1, IERR)

単精度サブルーチン:

CALL RBPDUC (A, LNA, N, COND, W1, IERR)

(3) **引 数**

D:倍精度実数型　Z:倍精度複素数型
R:単精度実数型　C:単精度複素数型
I: {32 ビット整数版では INTEGER(4), 64 ビット整数版では INTEGER(8)}

| 項番 | 引数名 | 型 | 大きさ | 入出力 | 内　容 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | A | {D, R} | LNA, N | 入 力 | 正値対称行列 $A$(2 次元配列型)(上三角型) |
| | | | | 出 力 | $A = LL^T$ と分解した時の, 上三角行列 $L^T$ (注意事項 (a) 参照) |
| 2 | LNA | I | 1 | 入 力 | 配列 A の整合寸法 |
| 3 | N | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の次数 |
| 4 | COND | {D, R} | 1 | 出 力 | 条件数の逆数 |
| 5 | W1 | {D, R} | N | ワーク | 作業領域 |
| 6 | IERR | I | 1 | 出 力 | エラーインディケータ |

(4) **制限条件**

(a) $0 < \mathrm{N} \leq \mathrm{LNA}$

(5) **エラーインディケータ**

| IERR の値 | 意　　　味 | 処　理　内　容 |
|---|---|---|
| 0 | 正常終了. | |
| 1000 | $N = 1$ であった. | $A(1,1) \leftarrow \sqrt{A(1,1)}$<br>$COND \leftarrow 1.0$ とする. |
| 2100 | 係数行列 A の $LL^T$ 分解の処理において, 対角要素が 0 に近いものがあった. 分解行列を使って求解もしくは逆行列を計算する場合, 精度の良い結果が得られない場合がある. | 処理を続ける. |
| 3000 | 制限条件 (a) を満足しなかった. | 処理を打ち切る. |
| $4000 + i$ | $i$ 段目の処理において, 対角要素が 0.0 以下となった.<br>$A$ は特異である. | 処理を打ち切る.<br>条件数は求められない. |

(6) **注意事項**

(a) 配列 A には, 上三角部分に上三角行列 $L^T$ が格納される. 下三角行列 $L$ は $L^T$ より算出されるので, 配列 A には格納されない. このサブルーチンは配列 A の上三角部分のみを使用する (2.5.1 図 2−5 参照).

(b) 条件数は $\|A\| \cdot \|A^{-1}\|$ で定義されるが, このサブルーチンで求められるのはその概算値である.

## 2.5.4 DBPDLS, RBPDLS 連立 1 次方程式 (LL$^{\mathrm{T}}$ 分解後の正値対称行列)

(1) **機 能**

コレスキー法で LL$^{\mathrm{T}}$ 分解された正値対称行列 $A$(2 次元配列型)(上三角型) を係数行列とする連立 1 次方程式 $LL^T\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ を解く.

(2) **使用法**

倍精度サブルーチン:

CALL DBPDLS (A, LNA, N, B, IERR)

単精度サブルーチン:

CALL RBPDLS (A, LNA, N, B, IERR)

(3) **引 数**

D:倍精度実数型　Z:倍精度複素数型　I: {32 ビット整数版では INTEGER(4), 64 ビット整数版では INTEGER(8)}
R:単精度実数型　C:単精度複素数型

| 項番 | 引数名 | 型 | 大きさ | 入出力 | 内　容 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | A | {D, R} | LNA, N | 入 力 | LL$^{\mathrm{T}}$ 分解後の係数行列 $A$(正値対称行列, 2 次元配列型, 上三角型) (注意事項 (a), (b) 参照) |
| 2 | LNA | I | 1 | 入 力 | 配列 A の整合寸法 |
| 3 | N | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の次数 |
| 4 | B | {D, R} | N | 入 力 | 定数ベクトル$\boldsymbol{b}$ |
| | | | | 出 力 | 解 $\boldsymbol{x}$ |
| 5 | IERR | I | 1 | 出 力 | エラーインディケータ |

(4) **制限条件**

(a) $0 < \mathrm{N} \leq \mathrm{LNA}$

(5) **エラーインディケータ**

| IERR の値 | 意　味 | 処 理 内 容 |
|---|---|---|
| 0 | 正常終了. | |
| 1000 | N = 1 であった. | $\mathrm{B}(1) \leftarrow \mathrm{B}(1)/\mathrm{A}(1,1)^2$ とする. |
| 3000 | 制限条件 (a) を満足しなかった. | 処理を打ち切る. |

(6) **注意事項**

(a) このサブルーチンを使用するには, 係数行列 $A$ を $\mathrm{LL^T}$ 分解しておく必要がある. 通常は 2.5.2 $\left\{\begin{matrix}\mathrm{DBPDUU}\\ \mathrm{RBPDUU}\end{matrix}\right\}$ を使用して分解するが, 条件数も求めたい場合は 2.5.3 $\left\{\begin{matrix}\mathrm{DBPDUC}\\ \mathrm{RBPDUC}\end{matrix}\right\}$ を使用する. また, 2.5.1 $\left\{\begin{matrix}\mathrm{DBPDSL}\\ \mathrm{RBPDSL}\end{matrix}\right\}$ を使用して同一の係数行列 $A$ を持つ連立 1 次方程式をすでに解いている場合は, その出力として得られる $\mathrm{LL^T}$ 分解を利用することもできる.

(b) 配列 A には, 上三角部分に上三角行列 $L^T$ が格納されていなければならない. 下三角行列 $L$ は $L^T$ より算出されるので, 配列 A には格納されていなくてよい.
このサブルーチンは配列 A の上三角部分のみを使用する (2.5.1 図 2−5 参照).

## 2.5.5 DBPDDI, RBPDDI 正値対称行列の行列式と逆行列

(1) **機 能**

コレスキー法で $LL^T$ 分解された正値対称行列 $A$(2 次元配列型)(上三角型) の行列式と逆行列を求める.

(2) **使用法**

倍精度サブルーチン:

CALL DBPDDI (A, LNA, N, DET, ISW, IERR)

単精度サブルーチン:

CALL RBPDDI (A, LNA, N, DET, ISW, IERR)

(3) **引 数**

D:倍精度実数型　Z:倍精度複素数型　I: {32 ビット整数版では INTEGER(4) / 64 ビット整数版では INTEGER(8)}
R:単精度実数型　C:単精度複素数型

| 項番 | 引数名 | 型 | 大きさ | 入出力 | 内　容 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | A | {D/R} | LNA, N | 入 力 | $LL^T$ 分解後の正値対称行列 $A$(2 次元配列型)(上三角型) (注意事項 (a), (b) 参照) |
| | | | | 出 力 | 行列 $A$ の逆行列 (注意事項 (b) 参照) |
| 2 | LNA | I | 1 | 入 力 | 配列 A の整合寸法 |
| 3 | N | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の次数 |
| 4 | DET | {D/R} | 2 | 出 力 | 行列 $A$ の行列式の値 (注意事項 (c) 参照) |
| 5 | ISW | I | 1 | 入 力 | 処理スイッチ<br>ISW>0:行列式の値を求める.<br>ISW=0:行列式の値と逆行列を求める.<br>ISW<0:逆行列を求める. |
| 6 | IERR | I | 1 | 出 力 | エラーインディケータ |

(4) **制限条件**

(a) $0 < \mathrm{N} \leq \mathrm{LNA}$

(5) **エラーインディケータ**

| IERR の値 | 意　味 | 処 理 内 容 |
|---|---|---|
| 0 | 正常終了. | |
| 1000 | $\mathrm{N} = 1$ であった. | $\mathrm{DET}(1) \leftarrow \mathrm{A}(1,1)^2$,<br>$\mathrm{DET}(2) \leftarrow 0.0$,<br>$\mathrm{A}(1,1) \leftarrow 1.0/\mathrm{A}(1,1)^2$ とする. |
| 3000 | 制限条件 (a) を満足しなかった. | 処理を打ち切る. |

(6) **注意事項**

(a) このサブルーチンを使用するには, 係数行列 $A$ を $\mathrm{LL^T}$ 分解しておく必要がある.
分解は 2.5.2 $\begin{Bmatrix}\text{DBPDUU}\\\text{RBPDUU}\end{Bmatrix}$, 2.5.3 $\begin{Bmatrix}\text{DBPDUC}\\\text{RBPDUC}\end{Bmatrix}$, 2.5.1 $\begin{Bmatrix}\text{DBPDSL}\\\text{RBPDSL}\end{Bmatrix}$のいずれかで行えばよい.

(b) 入力時の配列 A には上三角部分に上三角行列 $L^T$ が格納されていなければならない. 下三角行列 $L$ は $L^T$ より算出されるので, 配列 A には格納されていなくてよい. 逆行列 $A^{-1}$ はやはり対称行列であるので, 上三角部分のみが配列 A に格納される. このサブルーチンは配列 A の上三角部分のみを使用する (2.5.1 図 2−5 参照).

(c) 行列式の値は次の式によって与えられる.
$det(A) = \mathrm{DET}(1) \times 10^{\mathrm{DET}(2)}$
この時, $1.0 \leq |\mathrm{DET}(1)| < 10.0$ となるようにスケーリングされている.

(d) **行列の次数が 100 以下など十分に小さい場合や, 逆行列そのものが必要である場合を除いて, 逆行列を計算すべきではない.** 数値計算では多くの場合, 逆行列は, $A^{-1}\boldsymbol{b}$ や $A^{-1}B$ といった形式で現れるが, これらはそれぞれ, ベクトル $\boldsymbol{x}$ についての連立 1 次方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$, 行列 $X$ についての多重右辺連立 1 次方程式 $AX = B$ として連立 1 次方程式を解いて計算すべきである. 数学的には, 逆行列を求めて逆行列とベクトルの積や逆行列と行列の積を計算することと前述のような連立 1 次方程式を解くことは同じであるが, 数値計算上は一般に, 逆行列による求解は計算効率も悪く, 計算精度も劣る.

## 2.5.6 DBPDLX, RBPDLX 連立 1 次方程式の解の改良 (正値対称行列)

(1) **機 能**

正値対称行列 $A$(2 次元配列型)(上三角型) を係数行列とする連立 1 次方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ の解を反復法により改良する.

(2) **使用法**

倍精度サブルーチン:

CALL DBPDLX (A, LNA, N, ALL, B, X, ITOL, NIT, W1, IERR)

単精度サブルーチン:

CALL RBPDLX (A, LNA, N, ALL, B, X, ITOL, NIT, W1, IERR)

(3) **引 数**

D:倍精度実数型　Z:倍精度複素数型
R:単精度実数型　C:単精度複素数型
I: {32 ビット整数版では INTEGER(4) / 64 ビット整数版では INTEGER(8)}

| 項番 | 引数名 | 型 | 大きさ | 入出力 | 内容 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | A | {D/R} | LNA, N | 入 力 | 係数行列 $A$(正値対称行列, 2 次元配列型, 上三角型) |
| 2 | LNA | I | 1 | 入 力 | 配列 A, ALL の整合寸法 |
| 3 | N | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の次数 |
| 4 | ALL | {D/R} | LNA, N | 入 力 | $\mathrm{LL^T}$ 分解後の係数行列 $A$(注意事項 (a) 参照) |
| 5 | B | {D/R} | N | 入 力 | 定数ベクトル$\boldsymbol{b}$ |
| 6 | X | {D/R} | N | 入 力 | 近似解 $\boldsymbol{x}$ |
| | | | | 出 力 | 反復改良された解 $\boldsymbol{x}$ |
| 7 | ITOL | I | 1 | 入 力 | 改良したい桁数 (注意事項 (b) 参照) |
| | | | | 出 力 | 改良された桁数の近似数 (注意事項 (c) 参照) |
| 8 | NIT | I | 1 | 入 力 | 最大反復回数 (注意事項 (d) 参照) |
| 9 | W1 | {D/R} | N | ワーク | 作業領域 |
| 10 | IERR | I | 1 | 出 力 | エラーインディケータ |

(4) **制限条件**

(a) $0 < \mathrm{N} \leq \mathrm{LNA}$

### (5) エラーインディケータ

| IERR の値 | 意　　　　　味 | 処　理　内　容 |
|---|---|---|
| 0 | 正常終了. | |
| 1000 | N = 1 であった. | 解は改良されない. |
| 3000 | 制限条件 (a) を満足しなかった. | 処理を打ち切る. |
| 5000 | 最大反復回数以内で収束しなかった. | ITOL の出力値を計算し, 処理を打ち切る. |
| 6000 | 解を改良できなかった. | |

### (6) 注意事項

(a) このサブルーチンは, 2.5.1 $\left\{\begin{matrix}\mathrm{DBPDSL}\\ \mathrm{RBPDSL}\end{matrix}\right\}$ または 2.5.4 $\left\{\begin{matrix}\mathrm{DBPDLS}\\ \mathrm{RBPDLS}\end{matrix}\right\}$ によって得られた解を, さらに改良するものである. 従って, 入力として 2.5.1 $\left\{\begin{matrix}\mathrm{DBPDSL}\\ \mathrm{RBPDSL}\end{matrix}\right\}$, 2.5.2 $\left\{\begin{matrix}\mathrm{DBPDUU}\\ \mathrm{RBPDUU}\end{matrix}\right\}$ または 2.5.3 $\left\{\begin{matrix}\mathrm{DBPDUC}\\ \mathrm{RBPDUC}\end{matrix}\right\}$ によって分解された係数行列 $A$ を与えなければならない.

(b) 解の改良は, 解の上位 ITOL 桁が修正されなくなるまで反復される. ただし, 以下の条件を満たす場合は, 解の修正が下位 1 ビット以下になるまで反復される.
ITOL $\leq$ 0 または ITOL $\geq -$ LOG10 $(2 \times \varepsilon)$ ($\varepsilon$ : 誤差判定のための単位)

(c) 反復回数以内で, 要求された桁数が収束しなかった場合, 修正されなくなった桁数の近似値が ITOL に返される.

(d) NIT の入力値が 0 以下の場合, 既定値として 40 がとられる.

## 2.6 実対称行列 (2 次元配列型) (上三角型)

### 2.6.1 DBSPSL, RBSPSL
### 連立 1 次方程式 (実対称行列)

(1) **機 能**

実対称行列 $A$ (2 次元配列型) を係数行列とする連立 1 次方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ を修正コレスキー法を用いて解く.

(2) **使用法**

倍精度サブルーチン:

CALL DBSPSL (A, LNA, N, B, IPVT, WK, IERR)

単精度サブルーチン:

CALL RBSPSL (A, LNA, N, B, IPVT, WK, IERR)

(3) **引 数**

D:倍精度実数型　Z:倍精度複素数型　I: {32 ビット整数版では INTEGER(4) / 64 ビット整数版では INTEGER(8)}

R:単精度実数型　C:単精度複素数型

| 項番 | 引数名 | 型 | 大きさ | 入出力 | 内　　　容 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | A | {D/R} | LNA, N | 入 力 | 係数行列 $A$(実対称行列, 2 次元配列型, 上三角型) |
| | | | | 出 力 | $A = LDL^T$ と分解した時の上三角行列 $L^T$ (注意事項 (b) 参照) |
| 2 | LNA | I | 1 | 入 力 | 配列 A の整合寸法 |
| 3 | N | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の次数 |
| 4 | B | {D/R} | N | 入 力 | 定数ベクトル $\boldsymbol{b}$ |
| | | | | 出 力 | 解 $\boldsymbol{x}$ |
| 5 | IPVT | I | N | 出 力 | ピボッティング情報 IPVT(i) :<br>i 段目の処理において行 (列)i と交換した行 (列) の番号 (注意事項 (c) 参照) |
| 6 | WK | {D/R} | N | ワーク | 作業領域 |
| 7 | IERR | I | 1 | 出 力 | エラーインディケータ |

(4) **制限条件**

(a) $0 < \mathrm{N} \leq \mathrm{LNA}$

(5) **エラーインディケータ**

| IERR の値 | 意　　　味 | 処 理 内 容 |
|---|---|---|
| 0 | 正常終了. | |
| 1000 | N = 1 であった. | B(1) ← B(1)/A(1, 1) とする. |
| 2100 | 係数行列 A の LDL$^{\mathrm{T}}$ 分解の処理において, 対角要素が 0 に近いものがあった. 分解行列を使って求解もしくは逆行列を計算する場合, 精度の良い結果が得られない場合がある. | 処理を続ける. |
| 3000 | 制限条件 (a) を満足しなかった. | 処理を打ち切る. |
| $4000 + i$ | 係数行列 $A$ の LDL$^{\mathrm{T}}$ 分解の $i$ 段目の処理において, 対角要素が 0.0 となった. $A$ は特異にである. | |

(6) **注意事項**

(a) 定数ベクトル$\boldsymbol{b}$のみが異なる複数の連立 1 次方程式を解く場合には, このサブルーチンを一度使用した後, 続けて 2.6.4 $\left\{\begin{array}{l}\mathrm{DBSPLS}\\ \mathrm{RBSPLS}\end{array}\right\}$を配列 B の内容のみを変えて使用すればよい. このようにすれば行列 $A$ の LDL$^{\mathrm{T}}$ 分解が一度だけしか行われないため, 演算効率よく解が求まる.

(b) 配列 A には, 上三角行列 $L^T$ のみが格納される. 対角行列 $D$, および下三角行列 $L$ は $L^T$ より算出されるので, 配列 A には格納されない. 行列 $L$ は行列 $L^T$ の転置行列であり, 行列 $D$ は行列 $L^T$ の対角要素の逆数を成分とする対角行列である. このサブルーチンは配列 A の上三角部分のみを使用する.

図 2−6　行列 $L^T$ の格納状態と行列 $D$ の内容

行列 $L^T$

$$\begin{bmatrix} l_{1,1} & l_{2,1} & l_{3,1} & \cdots & l_{5,1} \\ 0.0 & l_{2,2} & l_{3,2} & \cdots & l_{5,2} \\ 0.0 & 0.0 & l_{3,3} & \cdots & l_{5,3} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0.0 & 0.0 & 0.0 & \cdots & l_{5,5} \end{bmatrix}$$

行列 $D$

$$\begin{bmatrix} 1/l_{1,1} & 0.0 & 0.0 & \cdots & 0.0 \\ 0.0 & 1/l_{2,2} & 0.0 & \cdots & 0.0 \\ 0.0 & 0.0 & 1/l_{3,3} & \cdots & 0.0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0.0 & 0.0 & 0.0 & \cdots & 1/l_{5,5} \end{bmatrix}$$

$$\Downarrow$$

配列A(LNA, K)の格納状態

$$\begin{array}{ccccc} l_{1,1} & l_{2,1} & l_{3,1} & \cdots & l_{5,1} \\ * & l_{2,2} & l_{3,2} & \cdots & l_{5,2} \\ * & * & l_{3,3} & \cdots & l_{5,3} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ * & * & * & \cdots & l_{5,5} \end{array}$$

N

LNA

←−−−−−−N−−−−−−→

←−−−−−−−−K−−−−−−−−→

**備　考**

a.　LNA ≥ N, N ≤ K を満たさなければならない.

b.　∗ に対応する入力時の値は保証されない.

(c) このサブルーチンでは, 係数行列 $A$ の $\mathrm{LDL}^{\mathrm{T}}$ 分解時に, 部分軸選択 (partial pivoting) が行われている. 部分軸選択は行と列について対称に行われる. 第 i 段目のピボット行 (列) が第 j 行 (列)(i $\leq$ j) となった場合, IPVT(i) に j が格納される. また, このとき, 行列 $A$ の第 i 行 (列) と第 j 行 (列) の対応する列 (行) 要素のうち, 第 i 列 (行) から第 n 列 (行) までの要素が実際に交換される.

## (7) **使用例**

(a) 問 題

$$\begin{bmatrix} 5 & 4 & 1 & 1 \\ 4 & 5 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 4 & 2 \\ 1 & 1 & 2 & 4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \\ 4 \\ -4 \end{bmatrix}$$ を解く.

(b) 入力データ

係数行列 $A$, LNA=11, N = 4, 定数ベクトル$\boldsymbol{b}$

(c) 主プログラム

```
      PROGRAM BBSPSL
! *** EXAMPLE OF DBSPSL ***
      IMPLICIT REAL(8) (A-H,O-Z)
      PARAMETER (LNA = 11)
      DIMENSION A(LNA,LNA),B(LNA),W1(LNA),IPVT(LNA)
!
      READ (5,*) N
      WRITE (6,1000) N
      DO 10 I = 1, N
         READ (5,*) (A(I,J),J=I,N)
         WRITE (6,1100) (A(J,I),J=1,I-1),(A(I,J),J=I,N)
   10 CONTINUE
      READ (5,*) (B(I),I=1,N)
      WRITE (6,1200) (B(I),I=1,N)
      WRITE (6,1300)
      CALL DBSPSL (A,LNA,N,B,IPVT,W1,IERR)
      WRITE (6,1400) 'DBSPSL',IERR
      IF (IERR .GE. 3000) STOP
      WRITE (6,1500) (I,B(I),I=1,N)
      STOP
!
 1000 FORMAT(' ',/,/,&
             ' ***  DBSPSL  ***',/,&
             2X,'**  INPUT  **',/,&
             6X,'N =',I3,/,&
             6X,'COEFFICIENT MATRIX')
 1100 FORMAT(7X,10(G11.4))
 1200 FORMAT(6X,'COEFFICIENT VECTOR',/,(7X,F10.4))
 1300 FORMAT(2X,'**  OUTPUT  **')
 1400 FORMAT(6X,'IERR (',A6,') =',I5)
 1500 FORMAT(6X,'SOLUTION',/,(8X,'X(',I2,') =',D18.10))
      END
```

(d) 出力結果

```
***  DBSPSL  ***
 **  INPUT  **
     N =  4
     COEFFICIENT MATRIX
        5.000      4.000      1.000      1.000
        4.000      5.000      1.000      1.000
        1.000      1.000      4.000      2.000
        1.000      1.000      2.000      4.000
     COEFFICIENT VECTOR
          1.0000
         -1.0000
          4.0000
         -4.0000
 **  OUTPUT  **
     IERR (DBSPSL) =    0
     SOLUTION
       X( 1) =  0.1000000000D+01
       X( 2) = -0.1000000000D+01
       X( 3) =  0.2000000000D+01
       X( 4) = -0.2000000000D+01
```

## 2.6.2 DBSPUD, RBSPUD
## 実対称行列の LDL<sup>T</sup> 分解

(1) **機 能**

実対称行列 $A$ (2 次元配列型) (上三角型) を修正コレスキー法を用いて $\mathrm{LDL^T}$ 分解する.

(2) **使用法**

倍精度サブルーチン:

CALL DBSPUD (A, LNA, N, IPVT, WK, IERR)

単精度サブルーチン:

CALL RBSPUD (A, LNA, N, IPVT, WK, IERR)

(3) **引 数**

D:倍精度実数型　Z:倍精度複素数型　I: { 32 ビット整数版では INTEGER(4) / 64 ビット整数版では INTEGER(8) }
R:単精度実数型　C:単精度複素数型

| 項番 | 引数名 | 型 | 大きさ | 入出力 | 内容 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | A | {D / R} | LNA, N | 入 力 | 実対称行列 $A$(2 次元配列型)(上三角型) |
| | | | | 出 力 | $A = LDL^T$ と分解した時の上三角行列 $L^T$ (注意事項 (a) 参照) |
| 2 | LNA | I | 1 | 入 力 | 配列 A の整合寸法 |
| 3 | N | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の次数 |
| 4 | IPVT | I | N | 出 力 | ピボッティング情報 IPVT(i) :<br>i 段目の処理において行 (列)i と交換した行 (列) の番号 (注意事項 (b) 参照) |
| 5 | WK | {D / R} | N | ワーク | 作業領域 |
| 6 | IERR | I | 1 | 出 力 | エラーインディケータ |

(4) **制限条件**

(a) $0 < \mathrm{N} \leq \mathrm{LNA}$

(5) **エラーインディケータ**

| IERR の値 | 意味 | 処理内容 |
|---|---|---|
| 0 | 正常終了. | |
| 1000 | N=1 であった. | 配列 A の内容は変更されない. |
| 2100 | 係数行列 A の $\mathrm{LDL^T}$ 分解の処理において, 対角要素が 0 に近いものがあった. 分解行列を使って求解もしくは逆行列を計算する場合, 精度の良い結果が得られない場合がある. | 処理を続ける. |
| 3000 | 制限条件 (a) を満足しなかった. | 処理を打ち切る. |
| $4000 + i$ | $i$ 段目の処理において, 対角要素が 0.0 となった.<br>$A$ は特異である. | |

(6) **注意事項**

(a) 配列 A には, 上三角行列 $L^T$ のみが格納される. 対角行列 $D$, および下三角行列 $L$ は $L^T$ より算出されるので, 配列 A には格納されない (2.6.1 図 2−6 参照).

(b) このサブルーチンでは, 係数行列 $A$ の $\mathrm{LDL^T}$ 分解時に, 部分軸選択 (partial pivoting) が行われている. 部分軸選択は行と列について対称に行われる. 第 i 段目のピボット行 (列) が第 j 行 (列)($\mathrm{i} \leq \mathrm{j}$) となった場合, IPVT(i) に j が格納される. また, このとき, 行列 $A$ の第 i 行 (列) と第 j 行 (列) の対応する列 (行) 要素のうち, 第 i 列 (行) から第 n 列 (行) までの要素が実際に交換される.

## 2.6.3 DBSPUC, RBSPUC 実対称行列の $\mathrm{LDL^T}$ 分解と条件数

(1) **機 能**

実対称行列 $A$ (2 次元配列型) (上三角型) を修正コレスキー法を用いて $\mathrm{LDL^T}$ 分解し, 条件数を求める.

(2) **使用法**

倍精度サブルーチン:

CALL DBSPUC (A, LNA, N, IPVT, COND, WK, IERR)

単精度サブルーチン:

CALL RBSPUC (A, LNA, N, IPVT, COND, WK, IERR)

(3) **引 数**

D:倍精度実数型　Z:倍精度複素数型　I: {32 ビット整数版では INTEGER(4), 64 ビット整数版では INTEGER(8)}
R:単精度実数型　C:単精度複素数型

| 項番 | 引数名 | 型 | 大きさ | 入出力 | 内　容 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | A | {D/R} | LNA, N | 入 力 | 実対称行列 $A$(2 次元配列型)(上三角型) |
| | | | | 出 力 | $A = LDL^T$ と分解した時の上三角行列 $L^T$ (注意事項 (a) 参照) |
| 2 | LNA | I | 1 | 入 力 | 配列 A の整合寸法 |
| 3 | N | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の次数 |
| 4 | IPVT | I | N | 出 力 | ピボッティング情報 IPVT(i) : i 段目の処理において行 (列)i と交換した行 (列) の番号 (注意事項 (b) 参照) |
| 5 | COND | {D/R} | 1 | 出 力 | 条件数の逆数 |
| 6 | WK | {D/R} | N | ワーク | 作業領域 |
| 7 | IERR | I | 1 | 出 力 | エラーインディケータ |

(4) **制限条件**

(a) $0 < \mathrm{N} \leq \mathrm{LNA}$

(5) **エラーインディケータ**

| IERR の値 | 意　　　味 | 処　理　内　容 |
|---|---|---|
| 0 | 正常終了. | |
| 1000 | N=1 であった. | 配列 A の内容は変更されない.<br>COND ← 1.0 とする. |
| 2100 | 係数行列 A の $\mathrm{LDL^T}$ 分解の処理において, 対角要素が 0 に近いものがあった. 分解行列を使って求解もしくは逆行列を計算する場合, 精度の良い結果が得られない場合がある. | 処理を続ける. |
| 3000 | 制限条件 (a) を満足しなかった. | 処理を打ち切る. |
| $4000+i$ | $i$ 段目の処理において, 対角要素が 0.0 となった.<br>$A$ は特異である. | 処理を打ち切る.<br>条件数は求められない. |

(6) **注意事項**

(a) 配列 A には, 上三角行列 $L^T$ のみが格納される. 対角行列 $D$, および下三角行列 $L$ は $L^T$ より算出されるので, 配列 A には格納されない (2.6.1 図 2−6 参照).

(b) このサブルーチンでは, 係数行列 $A$ の $\mathrm{LDL^T}$ 分解時に, 部分軸選択 (partial pivoting) が行われている. 部分軸選択は行と列について対称に行われる. 第 i 段目のピボット行 (列) が第 j 行 (列)(i ≤ j) となった場合, IPVT(i) に j が格納される. また, このとき, 行列 $A$ の第 i 行 (列) と第 j 行 (列) の対応する列 (行) 要素のうち, 第 i 列 (行) から第 n 列 (行) までの要素が実際に交換される.

(c) 条件数は $\|A\| \cdot \|A^{-1}\|$ で定義されるが, このサブルーチンで求められるのはその概算値である.

### 2.6.4 DBSPLS, RBSPLS
### 連立 1 次方程式 (LDL$^{\mathrm{T}}$ 分解後の実対称行列)

(1) **機 能**

修正コレスキー法で LDL$^{\mathrm{T}}$ 分解された実対称行列 $A$ (2 次元配列型) (上三角型) を係数行列とする連立 1 次方程式を解く.

(2) **使用法**

倍精度サブルーチン:

CALL DBSPLS (A, LNA, N, B, IPVT, IERR)

単精度サブルーチン:

CALL RBSPLS (A, LNA, N, B, IPVT, IERR)

(3) **引 数**

D:倍精度実数型　Z:倍精度複素数型　I: { 32 ビット整数版では INTEGER(4) / 64 ビット整数版では INTEGER(8) }
R:単精度実数型　C:単精度複素数型

| 項番 | 引数名 | 型 | 大きさ | 入出力 | 内　　容 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | A | {D/R} | LNA, N | 入 力 | LDL$^T$ 分解後の係数行列 $A$(実対称行列, 2 次元配列型, 上三角型) (注意事項 (a), (b) 参照) |
| 2 | LNA | I | 1 | 入 力 | 配列 A の整合寸法 |
| 3 | N | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の次数 |
| 4 | B | {D/R} | N | 入 力 | 定数ベクトル$\boldsymbol{b}$ |
| | | | | 出 力 | 解 $\boldsymbol{x}$ |
| 5 | IPVT | I | N | 出 力 | ピボッティング情報 IPVT(i) :<br>i 段目の処理において行 (列)i と交換した行 (列) の番号 (注意事項 (c) 参照) |
| 6 | IERR | I | 1 | 出 力 | エラーインディケータ |

(4) **制限条件**

(a) $0 < \mathrm{N} \leq \mathrm{LNA}$

(5) **エラーインディケータ**

| IERR の値 | 意　　味 | 処 理 内 容 |
|---|---|---|
| 0 | 正常終了. | |
| 1000 | $\mathrm{N} = 1$ であった. | $\mathrm{B}(1) \leftarrow \mathrm{B}(1)/\mathrm{A}(1,1)$ とする. |
| 3000 | 制限条件 (a) を満足しなかった. | 処理を打ち切る. |

(6) **注意事項**

(a) このサブルーチンを使用するには, 係数行列 $A$ を LDL$^{\mathrm{T}}$ 分解しておく必要がある. 通常は 2.6.2 $\left\{\begin{matrix}\text{DBSPUD}\\\text{RBSPUD}\end{matrix}\right\}$ を使用して分解するが, 条件数も求めたい場合は 2.6.3 $\left\{\begin{matrix}\text{DBSPUC}\\\text{RBSPUC}\end{matrix}\right\}$ を使用する. また, 2.6.1 $\left\{\begin{matrix}\text{DBSPSL}\\\text{RBSPSL}\end{matrix}\right\}$ を使用して同一の係数行列 $A$ を持つ連立 1 次方程式をすでに解いている場合は, その出力として得られる LDL$^{\mathrm{T}}$ 分解を利用することもできる. 定数ベクトル $b$ のみが異なる複数の連立 1 次方程式を解く場合には, 直接サブルーチン 2.6.5 $\left\{\begin{matrix}\text{DBSPMS}\\\text{RBSPMS}\end{matrix}\right\}$ を用いて計算する方が効率良く解が求まる.

(b) 配列 A には, 上三角行列 $L^T$ が格納されていなければならない. 対角行列 $D$ と下三角行列 $L$ は $L^T$ より算出されるので, 配列 A には格納されていなくてよい. このサブルーチンは配列 A の上三角部分のみを使用する (2.6.1 図 2−6 参照).

(c) このサブルーチンでは, 係数行列 $A$ の LDL$^{\mathrm{T}}$ 分解時に, 部分軸選択 (partial pivoting) が行われている. 部分軸選択は行と列について対称に行われる. 第 i 段目のピボット行 (列) が第 j 行 (列)(i $\leq$ j) となった場合, IPVT(i) に j が格納される. また, このとき, 行列 $A$ の第 i 行 (列) と第 j 行 (列) の対応する列 (行) 要素のうち, 第 i 列 (行) から第 n 列 (行) までの要素が実際に交換される.

### 2.6.5 DBSPMS, RBSPMS
### 多重右辺連立 1 次方程式 (LDL$^{\mathrm{T}}$ 分解後の実対称行列)

(1) **機 能**

LDL$^T$ 分解された実行列 $A$(上三角型) を係数行列とする連立 1 次方程式 $LDL^T\boldsymbol{x_i} = \boldsymbol{b_i}(i = 1, 2, \cdots, m)$ を解く. すなわち, $n \times m$ 行列 $B$ を $B = [\boldsymbol{b_1}, \boldsymbol{b_2}, \cdots, \boldsymbol{b_m}]$ と定義した時, $[\boldsymbol{x_1}, \boldsymbol{x_2}, \cdots, \boldsymbol{x_m}] = A^{-1}B$ を求める.

(2) **使用法**

倍精度サブルーチン:

CALL DBSPMS (A, LNA, N, B, LNB, M, IPVT, IERR)

単精度サブルーチン:

CALL RBSPMS (A, LNA, N, B, LNB, M, IPVT, IERR)

(3) **引 数**

D:倍精度実数型　Z:倍精度複素数型　I: $\left\{ \begin{array}{l} \text{32 ビット整数版では INTEGER(4)} \\ \text{64 ビット整数版では INTEGER(8)} \end{array} \right\}$
R:単精度実数型　C:単精度複素数型

| 項番 | 引数名 | 型 | 大きさ | 入出力 | 内　容 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | A | $\left\{\begin{array}{c}\mathrm{D}\\\mathrm{R}\end{array}\right\}$ | LNA, N | 入 力 | LDL$^{\mathrm{T}}$ 分解後の係数行列 $A$(実対称行列, 上三角型) (注意事項 (a), (b) 参照) |
| 2 | LNA | I | 1 | 入 力 | 配列 A の整合寸法 |
| 3 | N | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の次数 |
| 4 | B | $\left\{\begin{array}{c}\mathrm{D}\\\mathrm{R}\end{array}\right\}$ | LNB, M | 入 力 | 定数ベクトル$\boldsymbol{b_i}$からなる行列 $[\boldsymbol{b_1}, \boldsymbol{b_2}, \cdots, \boldsymbol{b_m}]$ |
| | | | | 出 力 | 解ベクトル$\boldsymbol{x_i}$からなる行列 $[\boldsymbol{x_1}, \boldsymbol{x_2}, \cdots, \boldsymbol{x_m}]$ |
| 5 | LNB | I | 1 | 入 力 | 配列 B の整合寸法 |
| 6 | M | I | 1 | 入 力 | 右辺ベクトルの数 |
| 7 | IPVT | I | N | 入 力 | ピボッティング情報 IPVT(i)： LDL$^{\mathrm{T}}$ 分解の i 段目の処理において行 i と交換した行の番号 (注意事項 (c) 参照) |
| 8 | IERR | I | 1 | 出 力 | エラーインディケータ |

(4) **制限条件**

(a) $0 < \mathrm{N} \leq \mathrm{LNA}, \mathrm{LNB}$

(b) $0 < \mathrm{M}$

(c) $0 < \mathrm{IPVT}(i) \leq \mathrm{N} \quad (i = 1, \ldots, \mathrm{N})$

(5) **エラーインディケータ**

| IERR の値 | 意　　　　味 | 処　理　内　容 |
|---|---|---|
| 0 | 正常終了 | |
| 1000 | N = 1 であった. | B(1, i) ← B(1, i)/A(1, 1) ($i = 1, 2, \cdots, $M) とする. |
| 3000 | 制限条件 (a) を満足しなかった. | 処理を打ち切る. |
| 3010 | 制限条件 (b) を満足しなかった. | |
| 3020 | 制限条件 (c) を満足しなかった. | |

(6) **注意事項**

(a) このサブルーチンを使用するには, 係数行列 $A$ を LDL$^T$ 分解しておく必要がある. 通常はサブルーチン 2.6.2 $\left\{\begin{matrix}\text{DBSPUD}\\\text{RBSPUD}\end{matrix}\right\}$ を使用して分解するが, 条件数も求めたい場合は 2.6.3 $\left\{\begin{matrix}\text{DBSPUC}\\\text{RBSPUC}\end{matrix}\right\}$ を使用する. また,2.6.1 $\left\{\begin{matrix}\text{DBSPSL}\\\text{RBSPSL}\end{matrix}\right\}$ を使用して, 同一の係数行列 $A$ を持つ連立 1 方程式をすでに解いている場合は, その出力として得られる LDL$^T$ 分解を利用することもできる.

(b) 入力時の配列 A には, 上三角行列 $L^T$ が格納されていなければならない. 対角行列 $D$, および下三角行列 $L$ は $L^T$ より算出されるので, 配列 A には格納されなくてよい. 逆行列 $A^{-1}$ はやはり対称行列であるので, 上三角部分のみが配列 A に格納される. このサブルーチンは配列 A の上三角部分のみを使用する.

(c) IPVT には, LDL$^T$ 分解時に行った部分軸選択 (partial pivoting) についての情報が格納されていなければならない. この情報は行列 $A$ の LDL$^T$ 分解を行う 2.6.2 $\left\{\begin{matrix}\text{DBSPUD}\\\text{RBSPUD}\end{matrix}\right\}$によって与えられる.

(7) **使用例**

(a) 問 題

$$\begin{bmatrix} 5 & 4 & 1 & 1 \\ 4 & 5 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 4 & 2 \\ 1 & 1 & 2 & 4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_{1,1} & x_{1,2} \\ x_{2,1} & x_{2,2} \\ x_{3,1} & x_{3,2} \\ x_{4,1} & x_{4,2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & -2 \\ -1 & 1 \\ 4 & 9 \\ -4 & 13 \end{bmatrix}$$

を解く.

(b) 入力データ

係数行列 $A$, LNA=10, N=4, 定数ベクトル$\boldsymbol{b}$からなる行列 $B$, LNB=10, M=2

(c) 主プログラム

```
      PROGRAM BBSPMS
! *** EXAMPLE OF DBSPMS ***
      IMPLICIT NONE
      INTEGER LNA,LNB,N,M,I,J,IERR
      PARAMETER (LNA=10,LNB=10,N=4,M=2)
      INTEGER IPVT(LNA)
      REAL(8) A(LNA,N),B(LNB,M),WK(LNA)
      DATA ((A(I,J),J=1,N),I=1,N)/&
           5.0D0,  4.0D0,  1.0D0,  1.0D0,&
           4.0D0,  5.0D0,  1.0D0,  1.0D0,&
           1.0D0,  1.0D0,  4.0D0,  2.0D0,&
           1.0D0,  1.0D0,  2.0D0,  4.0D0/
      DATA ((B(I,J),J=1,M),I=1,N)/&
            1.0D0, -2.0D0,&
           -1.0D0,  1.0D0,&
            4.0D0,  9.0D0,&
           -4.0D0, 13.0D0/
!
      WRITE (6,1000) N, M
      DO 10 I = 1, N
```

```
         WRITE (6,1100) (A(I,J),J=1,N)
   10 CONTINUE
      WRITE (6,1200)
      DO 20 I = 1, N
         WRITE (6,1100) (B(I,J),J=1,M)
   20 CONTINUE
      WRITE (6,1300)
!
      CALL DBSPUD (A,LNA,N,IPVT,WK,IERR)
      IF (IERR .GE. 3000) STOP
      CALL DBSPMS (A,LNA,N,B,LNB,M,IPVT,IERR)
      IF (IERR .GE. 3000) STOP
!
      WRITE (6,1400) IERR
      WRITE (6,1500)
      DO 30 I = 1, N
         WRITE (6,1100) (B(I,J),J=1,M)
   30 CONTINUE
      STOP
!
 1000 FORMAT(1X                              ,/,&
             1X, '***  DBSPMS  ***'       ,/,&
             1X, ' **  INPUT  **'        ,/,/,&
             1X, '     N =',I3             ,/,&
             1X, '     M =',I3             ,/,&
             1X,/,&
             1X, '    COEFFICIENT MATRIX'  )
 1100 FORMAT(1X, 6X,10(F11.4)              )
 1200 FORMAT(1X,/,&
             1X, '    CONSTANT VECTORS'    )
 1300 FORMAT(1X,/,&
             1X, ' **  OUTPUT  **'        ,/)
 1400 FORMAT(1X, '    IERR  =',I5          )
 1500 FORMAT(1X,/,&
             1X, '    SOLUTION'            )
      END
```

(d) 出力結果

```
***  DBSPMS  ***
 **  INPUT  **

     N =  4
     M =  2

    COEFFICIENT MATRIX
           5.0000     4.0000     1.0000     1.0000
           4.0000     5.0000     1.0000     1.0000
           1.0000     1.0000     4.0000     2.0000
           1.0000     1.0000     2.0000     4.0000

    CONSTANT VECTORS
           1.0000    -2.0000
          -1.0000     1.0000
           4.0000     9.0000
          -4.0000    13.0000

 **  OUTPUT  **

    IERR  =    0

    SOLUTION
           1.0000    -2.0000
          -1.0000     1.0000
           2.0000     1.0000
          -2.0000     3.0000
```

## 2.6.6 DBSPDI, RBSPDI 実対称行列の行列式と逆行列

(1) **機 能**

修正コレスキー法で $\mathrm{LDL^T}$ 分解された実対称行列 $A$ (2 次元配列型) (上三角型) の行列式と逆行列を求める.

(2) **使用法**

倍精度サブルーチン:

CALL DBSPDI (A, LNA, N, IPVT, DET, ISW, WK, IERR)

単精度サブルーチン:

CALL RBSPDI (A, LNA, N, IPVT, DET, ISW, WK, IERR)

(3) **引 数**

D:倍精度実数型　Z:倍精度複素数型
R:単精度実数型　C:単精度複素数型
I: {32 ビット整数版では INTEGER(4) / 64 ビット整数版では INTEGER(8)}

| 項番 | 引数名 | 型 | 大きさ | 入出力 | 内　容 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | A | {D/R} | LNA, N | 入 力 | $\mathrm{LDL^T}$ 分解後の実対称行列 $A$(2 次元配列型) (注意事項 (a), (b) 参照) |
| | | | | 出 力 | 行列 $A$ の逆行列 (注意事項 (b) 参照) |
| 2 | LNA | I | 1 | 入 力 | 配列 A の整合寸法 |
| 3 | N | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の次数 |
| 4 | IPVT | I | N | 出 力 | ピボッティング情報 IPVT(i) :<br>i 段目の処理において行 (列)i と交換した行 (列) の番号 (注意事項 (c) 参照) |
| 5 | DET | {D/R} | 2 | 出 力 | 行列 $A$ の行列式の値 (注意事項 (c) 参照) |
| 6 | ISW | I | 1 | 入 力 | 処理スイッチ<br>ISW>0:行列式の値を求める.<br>ISW=0:行列式の値と逆行列を求める.<br>ISW<0:逆行列を求める. |
| 7 | WK | {D/R} | N | ワーク | 作業領域 |
| 8 | IERR | I | 1 | 出 力 | エラーインディケータ |

(4) **制限条件**

(a) $0 < \mathrm{N} \leq \mathrm{LNA}$

(5) **エラーインディケータ**

| IERR の値 | 意　　　味 | 処　理　内　容 |
|---|---|---|
| 0 | 正常終了. | |
| 1000 | N = 1 であった. | DET(1) ← A(1, 1)<br>DET(2) ← 0.0<br>A(1, 1) ← 1.0/A(1, 1) とする. |
| 3000 | 制限条件 (a) を満足しなかった. | 処理を打ち切る. |

(6) **注意事項**

(a) このサブルーチンを使用するには, 係数行列 $A$ を $\mathrm{LDL^T}$ 分解しておく必要がある.
分解は 2.6.2 $\left\{\begin{matrix}\text{DBSPUD}\\ \text{RBSPUD}\end{matrix}\right\}$, 2.6.3 $\left\{\begin{matrix}\text{DBSPUC}\\ \text{RBSPUC}\end{matrix}\right\}$, 2.6.1 $\left\{\begin{matrix}\text{DBSPSL}\\ \text{RBSPSL}\end{matrix}\right\}$のいずれかで行えばよい.

(b) 入力時の配列 A には, 上三角行列 $L^T$ が格納されていなければならない. 対角行列 $D$, および下三角行列 $L$ は $L^T$ より算出されるので, 配列 A には格納されなくてよい. 逆行列 $A^{-1}$ はやはり対称行列であるので, 上三角部分のみが配列 A に格納される. このサブルーチンは配列 A の上三角部分のみを使用する (2.6.1 図 2−6 参照).

(c) このサブルーチンでは, 係数行列 $A$ の $\mathrm{LDL^T}$ 分解時に, 部分軸選択 (partial pivoting) が行われている. 部分軸選択は行と列について対称に行われる. 第 i 段目のピボット行 (列) が第 j 行 (列)(i ≤ j) となった場合, IPVT(i) に j が格納される. また, このとき, 行列 $A$ の第 i 行 (列) と第 j 行 (列) の対応する列 (行) 要素のうち, 第 i 列 (行) から第 n 列 (行) までの要素が実際に交換される.

(d) 行列式の値は次の式によって与えられる.
$det(A) = \mathrm{DET(1)} \times 10^{\mathrm{DET(2)}}$
このとき, $1.0 \le |\mathrm{DET(1)}| < 10.0$ となるようにスケーリングされている.

(e) **行列の次数が 100 以下など十分に小さい場合や, 逆行列そのものが必要である場合を除いて, 逆行列を計算すべきではない.** 数値計算では多くの場合, 逆行列は, $A^{-1}\boldsymbol{b}$ や $A^{-1}B$ といった形式で現れるが, これらはそれぞれ, ベクトル $\boldsymbol{x}$ についての連立 1 次方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$, 行列 $X$ についての多重右辺連立 1 次方程式 $AX = B$ として連立 1 次方程式を解いて計算すべきである. 数学的には, 逆行列を求めて逆行列とベクトルの積や逆行列と行列の積を計算することと前述のような連立 1 次方程式を解くことは同じであるが, 数値計算上は一般に, 逆行列による求解は計算効率も悪く, 計算精度も劣る.

## 2.6.7 DBSPLX, RBSPLX
## 連立 1 次方程式の解の改良 (実対称行列)

(1) **機 能**

実対称行列 $A$ (2 次元配列型) (上三角型) を係数行列とする連立 1 次方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ の解を反復法により改良する.

(2) **使用法**

倍精度サブルーチン:

CALL DBSPLX (A, LNA, N, ALD, B, X, ITOL, NIT, IPVT, WK, IERR)

単精度サブルーチン:

CALL RBSPLX (A, LNA, N, ALD, B, X, ITOL, NIT, IPVT, WK, IERR)

(3) **引 数**

D:倍精度実数型　Z:倍精度複素数型　I: { 32 ビット整数版では INTEGER(4) }
R:単精度実数型　C:単精度複素数型　　 { 64 ビット整数版では INTEGER(8) }

| 項番 | 引数名 | 型 | 大きさ | 入出力 | 内　容 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | A | {D, R} | LNA, N | 入 力 | 係数行列 $A$(実対称行列, 2 次元配列型, 上三角型) |
| 2 | LNA | I | 1 | 入 力 | 配列 A, ALD の整合寸法 |
| 3 | N | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の次数 |
| 4 | ALD | {D, R} | LNA, N | 入 力 | $\mathrm{LDL^T}$ 分解後の係数行列 $A$(注意事項 (a) 参照) |
| 5 | B | {D, R} | N | 入 力 | 定数ベクトル $\boldsymbol{b}$ |
| 6 | X | {D, R} | N | 入 力 | 近似解$\boldsymbol{x}$ |
| | | | | 出 力 | 反復改良された解$\boldsymbol{x}$ |
| 7 | ITOL | I | 1 | 入 力 | 改良したい桁数 (注意事項 (b) 参照) |
| | | | | 出 力 | 改良された桁数の近似値 (注意事項 (c) 参照) |
| 8 | NIT | I | 1 | 入 力 | 最大反復回数 (注意事項 (d) 参照) |
| 9 | IPVT | I | N | 出 力 | ピボッティング情報 (注意事項 (a) 参照) |
| 10 | WK | {D, R} | N | ワーク | 作業領域 |
| 11 | IERR | I | 1 | 出 力 | エラーインディケータ |

(4) **制限条件**

(a) $0 < \mathrm{N} \leq \mathrm{LNA}$

(5) **エラーインディケータ**

| IERR の値 | 意　　　味 | 処　理　内　容 |
|---|---|---|
| 0 | 正常終了. | |
| 1000 | N=1 であった. | 解は改良されない. |
| 3000 | 制限条件 (a) を満足しなかった. | 処理を打ち切る. |
| 5000 | 最大反復回数以内で収束しなかった. | ITOL の出力値を計算し, 処理を打ち切る. |
| 6000 | 解を改良できなかった. | |

(6) **注意事項**

(a) このサブルーチンは, 2.6.1 $\left\{\begin{matrix}\mathrm{DBSPSL}\\ \mathrm{RBSPSL}\end{matrix}\right\}$ または 2.6.4 $\left\{\begin{matrix}\mathrm{DBSPLS}\\ \mathrm{RBSPLS}\end{matrix}\right\}$ によって得られた解を, さらに改良するものである. 従って, 入力として 2.6.1 $\left\{\begin{matrix}\mathrm{DBSPSL}\\ \mathrm{RBSPSL}\end{matrix}\right\}$, 2.6.2 $\left\{\begin{matrix}\mathrm{DBSPUD}\\ \mathrm{RBSPUD}\end{matrix}\right\}$ または 2.6.3 $\left\{\begin{matrix}\mathrm{DBSPUC}\\ \mathrm{RBSPUC}\end{matrix}\right\}$ によって分解された係数行列 $A$ とその時得られたピボッティング情報を与えなければならない.

(b) 解の改良は, 解の上位 ITOL 桁が修正されなくなるまで反復される. ただし, 以下の条件を満たす場合は, 解の修正が下位 1 ビット以下になるまで反復される.
ITOL $\leq 0$ または ITOL $\geq -$ LOG10 $(2 \times \varepsilon)$ ($\varepsilon$ : 誤差判定のための単位)

(c) 反復回数以内で, 要求された桁数が収束しなかった場合, 修正されなくなった桁数の近似値が ITOL に返される.

(d) NIT の入力値が 0 以下の場合, 既定値として 40 がとられる.

## 2.7 実対称行列 (2 次元配列型) (上三角型) (軸選択なし)

### 2.7.1 DBSMSL, RBSMSL
### 連立 1 次方程式 (実対称行列) (軸選択なし)

(1) **機 能**

実対称行列 $A$(2 次元配列型) を係数行列とする連立 1 次方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ を修正コレスキー法を用いて解く.

(2) **使用法**

倍精度サブルーチン:

CALL DBSMSL (A, LNA, N, B, W1, IERR)

単精度サブルーチン:

CALL RBSMSL (A, LNA, N, B, W1, IERR)

(3) **引 数**

D:倍精度実数型　Z:倍精度複素数型　I: $\left\{\begin{array}{l}\text{32 ビット整数版では INTEGER(4)}\\ \text{64 ビット整数版では INTEGER(8)}\end{array}\right\}$
R:単精度実数型　C:単精度複素数型

| 項番 | 引数名 | 型 | 大きさ | 入出力 | 内　容 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | A | $\left\{\begin{array}{c}\text{D}\\ \text{R}\end{array}\right\}$ | LNA, N | 入 力 | 係数行列 $A$(実対称行列, 2 次元配列型, 上三角型) |
| | | | | 出 力 | $A = LDL^T$ と分解した時の上三角行列 $L^T$ (注意事項 (b) 参照) |
| 2 | LNA | I | 1 | 入 力 | 配列 A の整合寸法 |
| 3 | N | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の次数 |
| 4 | B | $\left\{\begin{array}{c}\text{D}\\ \text{R}\end{array}\right\}$ | N | 入 力 | 定数ベクトル $\boldsymbol{b}$ |
| | | | | 出 力 | 解 $\boldsymbol{x}$ |
| 5 | W1 | $\left\{\begin{array}{c}\text{D}\\ \text{R}\end{array}\right\}$ | N | ワーク | 作業領域 |
| 6 | IERR | I | 1 | 出 力 | エラーインディケータ |

(4) **制限条件**

(a) $0 < \text{N} \leq \text{LNA}$

## (5) エラーインディケータ

| IERR の値 | 意　　　　味 | 処　理　内　容 |
|---|---|---|
| 0 | 正常終了. | |
| 1000 | N = 1 であった. | B(1) ← B(1)/A(1, 1) とする. |
| 2100 | 係数行列 A の $\mathrm{LDL^T}$ 分解の処理において, 対角要素が 0 に近いものがあった. 分解行列を使って求解もしくは逆行列を計算する場合, 精度の良い結果が得られない場合がある. | 処理を続ける. |
| 3000 | 制限条件 (a) を満足しなかった. | 処理を打ち切る. |
| $4000 + i$ | 係数行列 $A$ の $\mathrm{LDL^T}$ 分解の $i$ 段目の処理において, 対角要素が 0.0 となった. $A$ は特異である. | |

## (6) 注意事項

(a) 定数ベクトル$\boldsymbol{b}$のみが異なる複数の連立 1 次方程式を解く場合には, このサブルーチンを一度使用した後, 続けて 2.7.4 $\left\{\begin{matrix}\text{DBSMLS}\\ \text{RBSMLS}\end{matrix}\right\}$を配列 B の内容のみを変えて使用すればよい. このようにすれば行列 $A$ の $\mathrm{LDL^T}$ 分解が一度だけしか行われないため, 演算効率よく解が求まる.

(b) 配列 A には, 上三角行列 $L^T$ のみが格納される. 対角行列 $D$, および下三角行列 $L$ は $L^T$ より算出されるので, 配列 A には格納されない. 行列 $L$ は行列 $L^T$ の転置行列であり, 行列 $D$ は行列 $L^T$ の対角要素の逆数を成分とする対角行列である. このサブルーチンは配列 A の上三角部分のみを使用する.

図 2−7　行列 $L^T$ の格納状態と行列 $D$ の内容

行列 $L^T$

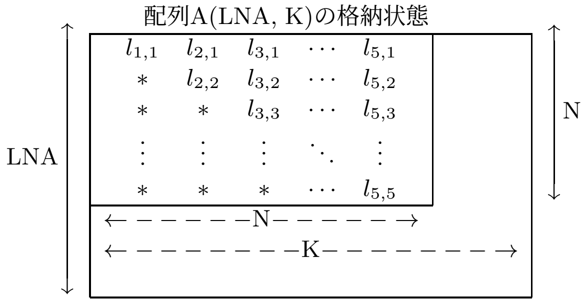
$$\begin{bmatrix} l_{1,1} & l_{2,1} & l_{3,1} & \cdots & l_{5,1} \\ 0.0 & l_{2,2} & l_{3,2} & \cdots & l_{5,2} \\ 0.0 & 0.0 & l_{3,3} & \cdots & l_{5,3} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0.0 & 0.0 & 0.0 & \cdots & l_{5,5} \end{bmatrix}$$

行列 $D$

$$\begin{bmatrix} 1/l_{1,1} & 0.0 & 0.0 & \cdots & 0.0 \\ 0.0 & 1/l_{2,2} & 0.0 & \cdots & 0.0 \\ 0.0 & 0.0 & 1/l_{3,3} & \cdots & 0.0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0.0 & 0.0 & 0.0 & \cdots & 1/l_{5,5} \end{bmatrix}$$

$$\Downarrow$$

配列A(LNA, K)の格納状態




**備　考**

a.　LNA ≥ N, N ≤ K を満たさなければならない.

b.　$*$ に対応する入力時の値は保証されない.

## (7) **使用例**

(a) 問 題

$$\begin{bmatrix} 5 & 4 & 1 & 1 \\ 4 & 5 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 4 & 2 \\ 1 & 1 & 2 & 4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \\ 4 \\ -4 \end{bmatrix}$$

を解く.

(b) 入力データ

係数行列 $A$, LNA=11, N = 4, 定数ベクトル$\boldsymbol{b}$

(c) 主プログラム

```
      PROGRAM BBSMSL
! *** EXAMPLE OF DBSMSL ***
      IMPLICIT REAL(8) (A-H,O-Z)
      PARAMETER (LNA = 11)
      DIMENSION A(LNA,LNA),B(LNA),W1(LNA)
!
      READ (5,*) N
      WRITE (6,1000) N
      DO 10 I = 1, N
         READ (5,*) (A(I,J),J=I,N)
         WRITE (6,1100) (A(J,I),J=1,I-1),(A(I,J),J=I,N)
   10 CONTINUE
      READ (5,*) (B(I),I=1,N)
      WRITE (6,1200) (B(I),I=1,N)
      WRITE (6,1300)
      CALL DBSMSL (A,LNA,N,B,W1,IERR)
      WRITE (6,1400) 'DBSMSL',IERR
      IF (IERR .GE. 3000) STOP
      WRITE (6,1500) (I,B(I),I=1,N)
      STOP
!
 1000 FORMAT(' ',/,/,&
             ' ***  DBSMSL  ***',/,&
             2X,'**  INPUT  **',/,&
             6X,'N =',I3,/,&
             6X,'COEFFICIENT MATRIX')
 1100 FORMAT(7X,10(G11.4))
 1200 FORMAT(6X,'COEFFICIENT VECTOR',/,(7X,F10.4))
 1300 FORMAT(2X,'**  OUTPUT  **')
 1400 FORMAT(6X,'IERR (',A6,') =',I5)
 1500 FORMAT(6X,'SOLUTION',/,(8X,'X(',I2,') =',D18.10))
      END
```

(d) 出力結果

```
***  DBSMSL  ***
 **  INPUT  **
     N =  4
     COEFFICIENT MATRIX
        5.000      4.000      1.000      1.000
        4.000      5.000      1.000      1.000
        1.000      1.000      4.000      2.000
        1.000      1.000      2.000      4.000
     COEFFICIENT VECTOR
          1.0000
         -1.0000
          4.0000
         -4.0000
 **  OUTPUT  **
     IERR (DBSMSL) =    0
     SOLUTION
       X( 1) =  0.1000000000D+01
       X( 2) = -0.1000000000D+01
       X( 3) =  0.2000000000D+01
       X( 4) = -0.2000000000D+01
```

### 2.7.2 DBSMUD, RBSMUD<br>実対称行列の LDL$^{\mathrm{T}}$ 分解 (軸選択なし)

(1) **機 能**

実対称行列 $A$(2 次元配列型)(上三角型) を修正コレスキー法を用いて LDL$^{\mathrm{T}}$ 分解する.

(2) **使用法**

倍精度サブルーチン:

CALL DBSMUD (A, LNA, N, W1, IERR)

単精度サブルーチン:

CALL RBSMUD (A, LNA, N, W1, IERR)

(3) **引 数**

D:倍精度実数型　Z:倍精度複素数型
R:単精度実数型　C:単精度複素数型
I: {32 ビット整数版では INTEGER(4) / 64 ビット整数版では INTEGER(8)}

| 項番 | 引数名 | 型 | 大きさ | 入出力 | 内容 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | A | {D / R} | LNA, N | 入 力 | 実対称行列 $A$(2 次元配列型)(上三角型) |
| | | | | 出 力 | $A = LDL^T$ と分解した時の上三角行列 $L^T$ (注意事項 (a) 参照) |
| 2 | LNA | I | 1 | 入 力 | 配列 A の整合寸法 |
| 3 | N | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の次数 |
| 4 | W1 | {D / R} | N | ワーク | 作業領域 |
| 5 | IERR | I | 1 | 出 力 | エラーインディケータ |

(4) **制限条件**

(a) $0 < \mathrm{N} \leq \mathrm{LNA}$

(5) **エラーインディケータ**

| IERR の値 | 意味 | 処理内容 |
|---|---|---|
| 0 | 正常終了. | |
| 1000 | N=1 であった. | 配列 A の内容は変更されない. |
| 2100 | 係数行列 A の LDL$^{\mathrm{T}}$ 分解の処理において, 対角要素が 0 に近いものがあった. 分解行列を使って求解もしくは逆行列を計算する場合, 精度の良い結果が得られない場合がある. | 処理を続ける. |
| 3000 | 制限条件 (a) を満足しなかった. | 処理を打ち切る. |
| $4000+i$ | $i$ 段目の処理において, 対角要素が 0.0 となった.<br>$A$ は特異である. | |

(6) **注意事項**

(a) 配列 A には, 上三角行列 $L^T$ のみが格納される. 対角行列 $D$, および下三角行列 $L$ は $L^T$ より算出されるので, 配列 A には格納されない (2.7.1 図 2−7 参照).

### 2.7.3 DBSMUC, RBSMUC 実対称行列の LDL$^{\mathrm{T}}$ 分解と条件数 (軸選択なし)

(1) **機 能**

実対称行列 $A$(2 次元配列型)(上三角型) を修正コレスキー法を用いて LDL$^{\mathrm{T}}$ 分解し, 条件数を求める.

(2) **使用法**

倍精度サブルーチン:

CALL DBSMUC (A, LNA, N, COND, W1, IERR)

単精度サブルーチン:

CALL RBSMUC (A, LNA, N, COND, W1, IERR)

(3) **引 数**

D:倍精度実数型　Z:倍精度複素数型　I: {32 ビット整数版では INTEGER(4), 64 ビット整数版では INTEGER(8)}
R:単精度実数型　C:単精度複素数型

| 項番 | 引数名 | 型 | 大きさ | 入出力 | 内　　容 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | A | {D, R} | LNA, N | 入 力 | 実対称行列 $A$(2 次元配列型)(上三角型) |
| | | | | 出 力 | $A = LDL^T$ と分解した時の上三角行列 $L^T$ (注意事項 (a) 参照) |
| 2 | LNA | I | 1 | 入 力 | 配列 A の整合寸法 |
| 3 | N | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の次数 |
| 4 | COND | {D, R} | 1 | 出 力 | 条件数の逆数 |
| 5 | W1 | {D, R} | N | ワーク | 作業領域 |
| 6 | IERR | I | 1 | 出 力 | エラーインディケータ |

(4) **制限条件**

(a) $0 < \mathrm{N} \leq \mathrm{LNA}$

(5) **エラーインディケータ**

| IERR の値 | 意　　　味 | 処　理　内　容 |
|---|---|---|
| 0 | 正常終了. | |
| 1000 | N = 1 であった. | 配列 A の内容は変更されない.<br>COND ← 1.0 とする. |
| 2100 | 係数行列 A の $\mathrm{LDL^T}$ 分解の処理において, 対角要素が 0 に近いものがあった. 分解行列を使って求解もしくは逆行列を計算する場合, 精度の良い結果が得られない場合がある. | 処理を続ける. |
| 3000 | 制限条件 (a) を満足しなかった. | 処理を打ち切る. |
| $4000 + i$ | $i$ 段目の処理において, 対角要素が 0.0 となった.<br>$A$ は特異である. | 処理を打ち切る.<br>条件数は求められない. |

(6) **注意事項**

(a) 配列 A には, 上三角行列 $L^T$ のみが格納される. 対角行列 $D$, および下三角行列 $L$ は $L^T$ より算出されるので, 配列 A には格納されない (2.7.1 図 2–7 参照).

(b) 条件数は $\|A\| \cdot \|A^{-1}\|$ で定義されるが, このサブルーチンで求められるのはその概算値である.

### 2.7.4 DBSMLS, RBSMLS
### 連立 1 次方程式 (LDL$^{\mathrm{T}}$ 分解後の実対称行列) (軸選択なし)

(1) **機 能**

修正コレスキー法で LDL$^{\mathrm{T}}$ 分解された実対称行列 $A$(2 次元配列型) (上三角型) を係数行列とする連立 1 次方程式を解く.

(2) **使用法**

倍精度サブルーチン:

CALL DBSMLS (A, LNA, N, B, IERR)

単精度サブルーチン:

CALL RBSMLS (A, LNA, N, B, IERR)

(3) **引 数**

D:倍精度実数型　Z:倍精度複素数型　I: { 32 ビット整数版では INTEGER(4) / 64 ビット整数版では INTEGER(8) }
R:単精度実数型　C:単精度複素数型

| 項番 | 引数名 | 型 | 大きさ | 入出力 | 内　容 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | A | {D / R} | LNA, N | 入 力 | LDL$^{T}$ 分解後の係数行列 $A$(実対称行列, 2 次元配列型, 上三角型) (注意事項 (a), (b) 参照) |
| 2 | LNA | I | 1 | 入 力 | 配列 A の整合寸法 |
| 3 | N | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の次数 |
| 4 | B | {D / R} | N | 入 力 | 定数ベクトル$\boldsymbol{b}$ |
| | | | | 出 力 | 解 $\boldsymbol{x}$ |
| 5 | IERR | I | 1 | 出 力 | エラーインディケータ |

(4) **制限条件**

(a) $0 < \mathrm{N} \leq \mathrm{LNA}$

(5) **エラーインディケータ**

| IERR の値 | 意　味 | 処 理 内 容 |
|---|---|---|
| 0 | 正常終了. | |
| 1000 | N = 1 であった. | B(1) ← B(1)/A(1, 1) とする. |
| 3000 | 制限条件 (a) を満足しなかった. | 処理を打ち切る. |

(6) **注意事項**

(a) このサブルーチンを使用するには, 係数行列 $A$ を LDL$^{\mathrm{T}}$ 分解しておく必要がある. 通常は 2.7.2 $\begin{Bmatrix}\text{DBSMUD}\\ \text{RBSMUD}\end{Bmatrix}$ を使用して分解するが, 条件数も求めたい場合は 2.7.3 $\begin{Bmatrix}\text{DBSMUC}\\ \text{RBSMUC}\end{Bmatrix}$ を使用する. また, 2.7.1 $\begin{Bmatrix}\text{DBSMSL}\\ \text{RBSMSL}\end{Bmatrix}$ を使用して同一の係数行列 $A$ を持つ連立 1 次方程式をすでに解いている場合は, その出力として得られる LDL$^{\mathrm{T}}$ 分解を利用することもできる. 定数ベクトル $b$ のみが異なる複数の連立 1 次方程式を解く場合には, 直接サブルーチン 2.7.5 $\begin{Bmatrix}\text{DBSMMS}\\ \text{RBSMMS}\end{Bmatrix}$ を用いて計算する方が効率良く解が求まる.

(b) 配列 A には, 上三角行列 $L^T$ が格納されていなければならない. 対角行列 $D$ と下三角行列 $L$ は $L^T$ より算出されるので, 配列 A には格納されていなくてよい. このサブルーチンは配列 A の上三角部分のみを使用する (2.7.1 図 2−7 参照).

## 2.7.5 DBSMMS, RBSMMS 多重右辺連立 1 次方程式 (LDL$^{\mathrm{T}}$ 分解後の実対称行列) (軸選択なし)

(1) **機 能**

LDL$^{T}$ 分解された実行列 $A$(上三角型) を係数行列とする連立 1 次方程式 $LDL^{T}\boldsymbol{x_i} = \boldsymbol{b_i}(i = 1, 2, \cdots, m)$ を解く. すなわち, $n \times m$ 行列 $B$ を $B = [\boldsymbol{b_1}, \boldsymbol{b_2}, \cdots, \boldsymbol{b_m}]$ と定義した時, $[\boldsymbol{x_1}, \boldsymbol{x_2}, \cdots, \boldsymbol{x_m}] = A^{-1}B$ を求める.

(2) **使用法**

倍精度サブルーチン:

CALL DBSMMS (A, LNA, N, B, LNB, M, IERR)

単精度サブルーチン:

CALL RBSMMS (A, LNA, N, B, LNB, M, IERR)

(3) **引 数**

D:倍精度実数型　Z:倍精度複素数型
R:単精度実数型　C:単精度複素数型
I: $\left\{\begin{array}{l}\text{32 ビット整数版では INTEGER(4)}\\ \text{64 ビット整数版では INTEGER(8)}\end{array}\right\}$

| 項番 | 引数名 | 型 | 大きさ | 入出力 | 内　　容 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | A | $\left\{\begin{matrix}\mathrm{D}\\ \mathrm{R}\end{matrix}\right\}$ | LNA, N | 入 力 | LDL$^{\mathrm{T}}$ 分解後の係数行列 $A$(実対称行列, 上三角型) (注意事項 (a), (b) 参照) |
| 2 | LNA | I | 1 | 入 力 | 配列 A の整合寸法 |
| 3 | N | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の次数 |
| 4 | B | $\left\{\begin{matrix}\mathrm{D}\\ \mathrm{R}\end{matrix}\right\}$ | LNB, M | 入 力 | 定数ベクトル$\boldsymbol{b_i}$からなる行列 $[\boldsymbol{b_1}, \boldsymbol{b_2}, \cdots, \boldsymbol{b_m}]$ |
| | | | | 出 力 | 解ベクトル$\boldsymbol{x_i}$からなる行列 $[\boldsymbol{x_1}, \boldsymbol{x_2}, \cdots, \boldsymbol{x_m}]$ |
| 5 | LNB | I | 1 | 入 力 | 配列 B の整合寸法 |
| 6 | M | I | 1 | 入 力 | 右辺ベクトルの数 |
| 7 | IERR | I | 1 | 出 力 | エラーインディケータ |

(4) **制限条件**

(a) $0 < \mathrm{N} \leq \mathrm{LNA}, \mathrm{LNB}$

(b) $0 < \mathrm{M}$

(5) **エラーインディケータ**

| IERR の値 | 意　　味 | 処 理 内 容 |
|---|---|---|
| 0 | 正常終了 | |
| 1000 | $\mathrm{N} = 1$ であった. | $\mathrm{B}(1, i) \leftarrow \mathrm{B}(1, i)/\mathrm{A}(1, 1)$ $(i = 1, 2, \cdots, \mathrm{M})$ とする. |
| 3000 | 制限条件 (a) を満足しなかった. | 処理を打ち切る. |
| 3010 | 制限条件 (b) を満足しなかった. | |

## (6) 注意事項

(a) このサブルーチンを使用するには, 係数行列 $A$ を LDL$^T$ 分解しておく必要がある. 通常はサブルーチン 2.7.2 $\left\{\begin{matrix}\text{DBSMUD}\\\text{RBSMUD}\end{matrix}\right\}$ を使用して分解するが, 条件数も求めたい場合は 2.7.3 $\left\{\begin{matrix}\text{DBSMUC}\\\text{RBSMUC}\end{matrix}\right\}$ を使用する. また,2.7.1 $\left\{\begin{matrix}\text{DBSMSL}\\\text{RBSMSL}\end{matrix}\right\}$ を使用して, 同一の係数行列 $A$ を持つ連立 1 方程式をすでに解いている場合は, その出力として得られる LDL$^T$ 分解を利用することもできる.

(b) 入力時の配列 A には, 上三角行列 $L^T$ が格納されていなければならない. 対角行列 $D$, および下三角行列 $L$ は $L^T$ より算出されるので, 配列 A には格納されなくてよい. 逆行列 $A^{-1}$ はやはり対称行列であるので, 上三角部分のみが配列 A に格納される. このサブルーチンは配列 A の上三角部分のみを使用する.

## (7) 使用例

(a) 問 題

$$\begin{bmatrix} 5 & 4 & 1 & 1 \\ 4 & 5 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 4 & 2 \\ 1 & 1 & 2 & 4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_{1,1} & x_{1,2} \\ x_{2,1} & x_{2,2} \\ x_{3,1} & x_{3,2} \\ x_{4,1} & x_{4,2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & -2 \\ -1 & 1 \\ 4 & 9 \\ -4 & 13 \end{bmatrix}$$

を解く.

(b) 入力データ

係数行列 $A$, LNA=10, N=4, 定数ベクトル$\boldsymbol{b}$からなる行列 $B$, LNB=10, M=2

(c) 主プログラム

```
      PROGRAM BBSMMS
! *** EXAMPLE OF DBSMMS ***
      IMPLICIT NONE
      INTEGER LNA,LNB,N,M,I,J,IERR
      PARAMETER (LNA=10,LNB=10,N=4,M=2)
      REAL(8) A(LNA,N),B(LNB,M),WK(LNA)
      DATA ((A(I,J),J=1,N),I=1,N)/&
           5.0D0,  4.0D0,  1.0D0,  1.0D0,&
           4.0D0,  5.0D0,  1.0D0,  1.0D0,&
           1.0D0,  1.0D0,  4.0D0,  2.0D0,&
           1.0D0,  1.0D0,  2.0D0,  4.0D0/
      DATA ((B(I,J),J=1,M),I=1,N)/&
            1.0D0, -2.0D0,&
           -1.0D0,  1.0D0,&
            4.0D0,  9.0D0,&
           -4.0D0, 13.0D0/
!
      WRITE (6,1000) N, M
      DO 10 I = 1, N
         WRITE (6,1100) (A(I,J),J=1,N)
   10 CONTINUE
      WRITE (6,1200)
      DO 20 I = 1, N
         WRITE (6,1100) (B(I,J),J=1,M)
   20 CONTINUE
      WRITE (6,1300)
!
      CALL DBSMUD (A,LNA,N,WK,IERR)
      IF (IERR .GE. 3000) STOP
      CALL DBSMMS (A,LNA,N,B,LNB,M,IERR)
      IF (IERR .GE. 3000) STOP
!
      WRITE (6,1400) IERR
      WRITE (6,1500)
      DO 30 I = 1, N
         WRITE (6,1100) (B(I,J),J=1,M)
   30 CONTINUE
      STOP
!
 1000 FORMAT(1X                          ,/,&
             1X, '***  DBSMMS  ***'      ,/,&
             1X, ' **  INPUT  **'       ,/,/,&
             1X, '     N =',I3           ,/,&
             1X, '     M =',I3           ,/,&
             1X,/,&
             1X, '    COEFFICIENT MATRIX'  )
 1100 FORMAT(1X, 6X,10(F11.4)             )
 1200 FORMAT(1X,/,&
             1X, '    CONSTANT VECTORS'    )
```

```
 1300 FORMAT(1X,/,&
            1X, ' **  OUTPUT  **'         ,/)
 1400 FORMAT(1X, '     IERR  =',I5         )
 1500 FORMAT(1X,/,&
            1X, '     SOLUTION'            )
      END
```

(d) 出力結果

```
 ***  DBSMMS  ***
  **  INPUT  **

      N =  4
      M =  2

     COEFFICIENT MATRIX
            5.0000     4.0000     1.0000     1.0000
            4.0000     5.0000     1.0000     1.0000
            1.0000     1.0000     4.0000     2.0000
            1.0000     1.0000     2.0000     4.0000

     CONSTANT VECTORS
            1.0000    -2.0000
           -1.0000     1.0000
            4.0000     9.0000
           -4.0000    13.0000

  **  OUTPUT  **

     IERR  =    0

     SOLUTION
            1.0000    -2.0000
           -1.0000     1.0000
            2.0000     1.0000
           -2.0000     3.0000
```

## 2.7.6 DBSMDI, RBSMDI 実対称行列の行列式と逆行列 (軸選択なし)

(1) **機 能**

修正コレスキー法で $LDL^T$ 分解された実対称行列 $A$(2 次元配列型) (上三角型) の行列式と逆行列を求める.

(2) **使用法**

倍精度サブルーチン:

CALL DBSMDI (A, LNA, N, DET, ISW, W1, IERR)

単精度サブルーチン:

CALL RBSMDI (A, LNA, N, DET, ISW, W1, IERR)

(3) **引 数**

D:倍精度実数型　Z:倍精度複素数型　I: {32 ビット整数版では INTEGER(4) / 64 ビット整数版では INTEGER(8)}
R:単精度実数型　C:単精度複素数型

| 項番 | 引数名 | 型 | 大きさ | 入出力 | 内　容 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | A | {D/R} | LNA, N | 入 力 | $LDL^T$ 分解後の実対称行列 $A$(2 次元配列型) (注意事項 (a), (b) 参照) |
| | | | | 出 力 | 行列 $A$ の逆行列 (注意事項 (b) 参照) |
| 2 | LNA | I | 1 | 入 力 | 配列 A の整合寸法 |
| 3 | N | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の次数 |
| 4 | DET | {D/R} | 2 | 出 力 | 行列 $A$ の行列式の値 (注意事項 (c) 参照) |
| 5 | ISW | I | 1 | 入 力 | 処理スイッチ<br>ISW>0:行列式の値を求める.<br>ISW=0:行列式の値と逆行列を求める.<br>ISW<0:逆行列を求める. |
| 6 | W1 | {D/R} | N | ワーク | 作業領域 |
| 7 | IERR | I | 1 | 出 力 | エラーインディケータ |

(4) **制限条件**

(a) $0 < N \leq LNA$

(5) **エラーインディケータ**

| IERR の値 | 意　　味 | 処　理　内　容 |
|---|---|---|
| 0 | 正常終了. | |
| 1000 | N = 1 であった. | DET(1) ← A(1, 1),<br>DET(2) ← 0.0,<br>A(1, 1) ← 1.0/A(1, 1) とする. |
| 3000 | 制限条件 (a) を満足しなかった. | 処理を打ち切る. |

(6) **注意事項**

(a) このサブルーチンを使用するには, 係数行列 $A$ を $\mathrm{LDL^T}$ 分解しておく必要がある.
分解は 2.7.2 $\left\{\begin{matrix}\mathrm{DBSMUD}\\ \mathrm{RBSMUD}\end{matrix}\right\}$, 2.7.3 $\left\{\begin{matrix}\mathrm{DBSMUC}\\ \mathrm{RBSMUC}\end{matrix}\right\}$, 2.7.1 $\left\{\begin{matrix}\mathrm{DBSMSL}\\ \mathrm{RBSMSL}\end{matrix}\right\}$ のいずれかで行えばよい.

(b) 入力時の配列 A には, 上三角行列 $L^T$ が格納されていなければならない. 対角行列 $D$, および下三角行列 $L$ は $L^T$ より算出されるので, 配列 A には格納されなくてよい. 逆行列 $A^{-1}$ はやはり対称行列であるので, 上三角部分のみが配列 A に格納される. このサブルーチンは配列 A の上三角部分のみを使用する (2.7.1 図 2–7 参照).

(c) 行列式の値は次の式によって与えられる.
$det(A) = \mathrm{DET}(1) \times 10^{\mathrm{DET}(2)}$
このとき, $1.0 \le |\mathrm{DET}(1)| < 10.0$ となるようにスケーリングされている.

(d) **行列の次数が 100 以下など十分に小さい場合や, 逆行列そのものが必要である場合を除いて, 逆行列を計算すべきではない.** 数値計算では多くの場合, 逆行列は, $A^{-1}\boldsymbol{b}$ や $A^{-1}B$ といった形式で現れるが, これらはそれぞれ, ベクトル $\boldsymbol{x}$ についての連立 1 次方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$, 行列 $X$ についての多重右辺連立 1 次方程式 $AX = B$ として連立 1 次方程式を解いて計算すべきである. 数学的には, 逆行列を求めて逆行列とベクトルの積や逆行列と行列の積を計算することと前述のような連立 1 次方程式を解くことは同じであるが, 数値計算上は一般に, 逆行列による求解は計算効率も悪く, 計算精度も劣る.

## 2.7.7 DBSMLX, RBSMLX
## 連立 1 次方程式の解の改良 (実対称行列) (軸選択なし)

(1) **機 能**

実対称行列 $A$(2 次元配列型)(上三角型) を係数行列とする連立 1 次方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ の解を反復法により改良する.

(2) **使用法**

倍精度サブルーチン:

CALL DBSMLX (A, LNA, N, ALD, B, X, ITOL, NIT, W1, IERR)

単精度サブルーチン:

CALL RBSMLX (A, LNA, N, ALD, B, X, ITOL, NIT, W1, IERR)

(3) **引 数**

D:倍精度実数型　Z:倍精度複素数型
R:単精度実数型　C:単精度複素数型

I: { 32 ビット整数版では INTEGER(4) / 64 ビット整数版では INTEGER(8) }

| 項番 | 引数名 | 型 | 大きさ | 入出力 | 内　容 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | A | {D / R} | LNA, N | 入 力 | 係数行列 $A$(実対称行列, 2 次元配列型, 上三角型) |
| 2 | LNA | I | 1 | 入 力 | 配列 A, ALD の整合寸法 |
| 3 | N | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の次数 |
| 4 | ALD | {D / R} | LNA, N | 入 力 | $\mathrm{LDL^T}$ 分解後の係数行列 $A$(注意事項 (a) 参照) |
| 5 | B | {D / R} | N | 入 力 | 定数ベクトル $\boldsymbol{b}$ |
| 6 | X | {D / R} | N | 入 力 | 近似解$\boldsymbol{x}$ |
| | | | | 出 力 | 反復改良された解$\boldsymbol{x}$ |
| 7 | ITOL | I | 1 | 入 力 | 改良したい桁数 (注意事項 (b) 参照) |
| | | | | 出 力 | 改良された桁数の近似値 (注意事項 (c) 参照) |
| 8 | NIT | I | 1 | 入 力 | 最大反復回数 (注意事項 (d) 参照) |
| 9 | W1 | {D / R} | N | ワーク | 作業領域 |
| 10 | IERR | I | 1 | 出 力 | エラーインディケータ |

(4) **制限条件**

(a) $0 < \mathrm{N} \leq \mathrm{LNA}$

(5) **エラーインディケータ**

| IERR の値 | 意　　　味 | 処　理　内　容 |
|---|---|---|
| 0 | 正常終了. | |
| 1000 | N = 1 であった. | 解は改良されない. |
| 3000 | 制限条件 (a) を満足しなかった. | 処理を打ち切る. |
| 5000 | 最大反復回数以内で収束しなかった. | ITOL の出力値を計算し, 処理を打ち切る. |
| 6000 | 解を改良できなかった. | |

(6) **注意事項**

(a) このサブルーチンは, 2.7.1 $\left\{\begin{matrix}\text{DBSMSL}\\\text{RBSMSL}\end{matrix}\right\}$ または 2.7.4 $\left\{\begin{matrix}\text{DBSMLS}\\\text{RBSMLS}\end{matrix}\right\}$ によって得られた解を, さらに改良するものである. 従って, 入力として 2.7.1 $\left\{\begin{matrix}\text{DBSMSL}\\\text{RBSMSL}\end{matrix}\right\}$, 2.7.2 $\left\{\begin{matrix}\text{DBSMUD}\\\text{RBSMUD}\end{matrix}\right\}$ または 2.7.3 $\left\{\begin{matrix}\text{DBSMUC}\\\text{RBSMUC}\end{matrix}\right\}$ によって分解された係数行列 $A$ を与えなければならない.

(b) 解の改良は, 解の上位 ITOL 桁が修正されなくなるまで反復される. ただし, 以下の条件を満たす場合は, 解の修正が下位 1 ビット以下になるまで反復される.
ITOL $\leq$ 0 または ITOL $\geq -$ LOG10 $(2 \times \varepsilon)$ ($\varepsilon$ : 誤差判定のための単位)

(c) 反復回数以内で, 要求された桁数が収束しなかった場合, 修正されなくなった桁数の近似値が ITOL に返される.

(d) NIT の入力値が 0 以下の場合, 既定値として 40 がとられる.

## 2.8 実対称行列 (2 次元配列型) (下三角型)(軸選択なし)

### 2.8.1 DBSNSL, RBSNSL 連立 1 次方程式 (実対称行列)(軸選択なし)

(1) **機 能**

実対称行列 $A$(2 次元配列型)(下三角型) を係数行列とする連立 1 次方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ を修正コレスキー法を用いて解く.

(2) **使用法**

倍精度サブルーチン:

CALL DBSNSL (A, LNA, N, B, IERR)

単精度サブルーチン:

CALL RBSNSL (A, LNA, N, B, IERR)

(3) **引 数**

D:倍精度実数型　Z:倍精度複素数型　I: $\left\{\begin{array}{l}\text{32 ビット整数版では INTEGER(4)}\\\text{64 ビット整数版では INTEGER(8)}\end{array}\right\}$

R:単精度実数型　C:単精度複素数型

| 項番 | 引数名 | 型 | 大きさ | 入出力 | 内容 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | A | $\left\{\begin{matrix}\mathrm{D}\\\mathrm{R}\end{matrix}\right\}$ | LNA, N | 入 力 | 係数行列 $A$(実対称行列, 2 次元配列型, 下三角型) |
| | | | | 出 力 | $A = U^TDU$ と分解した時の下三角行列 $U^T$ (注意事項 (b) 参照) |
| 2 | LNA | I | 1 | 入 力 | 配列 A の整合寸法 |
| 3 | N | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の次数 |
| 4 | B | $\left\{\begin{matrix}\mathrm{D}\\\mathrm{R}\end{matrix}\right\}$ | N | 入 力 | 定数ベクトル$\boldsymbol{b}$ |
| | | | | 出 力 | 解 $\boldsymbol{x}$ |
| 5 | IERR | I | 1 | 出 力 | エラーインディケータ |

(4) **制限条件**

(a) $0 < \mathrm{N} \leq \mathrm{LNA}$

(5) **エラーインディケータ**

| IERR の値 | 意　味 | 処 理 内 容 |
|---|---|---|
| 0 | 正常終了. | |
| 1000 | N = 1 であった. | B(1) ← B(1)/A(1, 1) とする. |
| 2100 | 係数行列 A の $\mathrm{U^TDU}$ 分解の処理において, 対角要素が 0 に近いものがあった. 分解行列を使って求解もしくは逆行列を計算する場合, 精度の良い結果が得られない場合がある. | 処理を続ける. |
| 3000 | 制限条件 (a) を満足しなかった. | 処理を打ち切る. |
| $4000 + i$ | 係数行列 $A$ の $\mathrm{U^TDU}$ 分解の $i$ 段目の処理において, 対角要素が 0.0 となった. $A$ は特異である. | |

### (6) 注意事項

(a) 定数ベクトル$\boldsymbol{b}$のみが異なる複数の連立 1 次方程式を解く場合には, このサブルーチンを一度使用した後, 続けて 2.8.3 $\left\{\begin{matrix}\text{DBSNLS}\\ \text{RBSNLS}\end{matrix}\right\}$を配列 B の内容のみを変えて使用すればよい. このようにすれば行列 $A$ の $\mathrm{U^TDU}$ 分解が一度だけしか行われないため, 演算効率よく解が求まる.

(b) 配列 A には, 下三角行列 $U^T$ のみが格納される. $U^T$ の対角成分はその逆数が符号をかえて格納される. 対角行列 $D$, および上三角行列 $U$ は $U^T$ より算出されるので, 配列 A には格納されない. 行列 $U$ は行列 $U^T$ の転置行列であり, 行列 $D$ は行列 $U^T$ の対角要素の逆数を成分とする対角行列である. このサブルーチンは配列 A の下三角部分のみを使用する.

図 2−8　行列 $U^T$ の格納状態と行列 $D$ の内容

行列 $U^T$

$$\begin{bmatrix} u_{1,1} & 0.0 & 0.0 & \cdots & 0.0 \\ u_{2,1} & u_{2,2} & 0.0 & \cdots & 0.0 \\ u_{3,1} & u_{3,2} & u_{3,3} & \cdots & 0.0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ u_{5,1} & u_{5,2} & u_{5,3} & \cdots & u_{5,5} \end{bmatrix}$$

行列 $D$

$$\begin{bmatrix} 1/u_{1,1} & 0.0 & 0.0 & \cdots & 0.0 \\ 0.0 & 1/u_{2,2} & 0.0 & \cdots & 0.0 \\ 0.0 & 0.0 & 1/u_{3,3} & \cdots & 0.0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0.0 & 0.0 & 0.0 & \cdots & 1/u_{5,5} \end{bmatrix}$$

$$\Downarrow$$

配列A(LNA, K)の格納状態

$$\begin{array}{c|ccccc|}\hline & -1/u_{1,1} & * & * & \cdots & * \\ & u_{2,1} & -1/u_{2,2} & * & \cdots & * \\ & u_{3,1} & u_{3,2} & -1/u_{3,3} & \cdots & * \\ \text{LNA} & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ & u_{5,1} & u_{5,2} & u_{5,3} & \cdots & -1/u_{5,5} \\ \hline \end{array}$$

N（行数）: ←−−−−−−N−−−−−−→
←−−−−−−−−K−−−−−−−−→

**備　考**
a.　LNA ≥ N, N ≤ K を満たさなければならない.
b.　∗ に対応する入力時の値は保証されない.

(7) **使用例**

(a) 問 題

$$\begin{bmatrix} 5 & 4 & 1 & 1 \\ 4 & 5 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 4 & 2 \\ 1 & 1 & 2 & 4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \\ 4 \\ -4 \end{bmatrix}$$

を解く.

(b) 入力データ

係数行列 $A$, LNA=11, N = 4, 定数ベクトル$\boldsymbol{b}$

(c) 主プログラム

```
      PROGRAM BBSNSL
! *** EXAMPLE OF DBSNSL ***
      IMPLICIT REAL(8) (A-H,O-Z)
      PARAMETER (LNA = 11)
      DIMENSION A(LNA,LNA),B(LNA)
!
      READ (5,*) N
      WRITE (6,1000) N
      DO 10 I = 1, N
         READ (5,*) (A(I,J),J=1,I)
   10 CONTINUE
      DO 20 I = 1, N
         WRITE (6,1100) (A(I,J),J=1,I),(A(J,I),J=I+1,N)
   20 CONTINUE
      READ (5,*) (B(I),I=1,N)
      WRITE (6,1200) (B(I),I=1,N)
      WRITE (6,1300)
      CALL DBSNSL (A,LNA,N,B,IERR)
      WRITE (6,1400) 'DBSNSL',IERR
      IF (IERR .GE. 3000) STOP
      WRITE (6,1500) (I,B(I),I=1,N)
      STOP
!
 1000 FORMAT(' ',/,/,' ***  DBSNSL  ***',/,&
             2X,'**  INPUT  **',/,6X,'N =',I3,/,&
             6X,'COEFFICIENT MATRIX')
 1100 FORMAT(7X,10(G11.4))
 1200 FORMAT(6X,'COEFFICIENT VECTOR',/,(7X,F10.4))
 1300 FORMAT(2X,'**  OUTPUT  **')
 1400 FORMAT(6X,'IERR (',A6,') =',I5)
 1500 FORMAT(6X,'SOLUTION',/,(8X,'X(',I2,') =',D18.10))
      END
```

(d) 出力結果

```
 ***  DBSNSL  ***
  **  INPUT  **
      N =  4
      COEFFICIENT MATRIX
         5.000      4.000      1.000      1.000
         4.000      5.000      1.000      1.000
         1.000      1.000      4.000      2.000
         1.000      1.000      2.000      4.000
      COEFFICIENT VECTOR
           1.0000
          -1.0000
           4.0000
          -4.0000
  **  OUTPUT  **
      IERR (DBSNSL) =    0
      SOLUTION
        X( 1) =  0.1000000000D+01
        X( 2) = -0.1000000000D+01
        X( 3) =  0.2000000000D+01
        X( 4) = -0.2000000000D+01
```

### 2.8.2 DBSNUD, RBSNUD 実対称行列の $\mathrm{U^TDU}$ 分解 (軸選択なし)

(1) **機 能**

実対称行列 $A$(2 次元配列型)(下三角型) を修正コレスキー法を用いて $\mathrm{U^TDU}$ 分解する.

(2) **使用法**

倍精度サブルーチン:

CALL DBSNUD (A, LNA, N, IERR)

単精度サブルーチン:

CALL RBSNUD (A, LNA, N, IERR)

(3) **引 数**

D:倍精度実数型　Z:倍精度複素数型　I: {32 ビット整数版では INTEGER(4), 64 ビット整数版では INTEGER(8)}
R:単精度実数型　C:単精度複素数型

| 項番 | 引数名 | 型 | 大きさ | 入出力 | 内　　容 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | A | {D, R} | LNA, N | 入 力 | 実対称行列 $A$(2 次元配列型)(下三角型) |
| | | | | 出 力 | $A = U^T DU$ と分解した時の下三角行列 $U^T$ (注意事項 (a) 参照) |
| 2 | LNA | I | 1 | 入 力 | 配列 A の整合寸法 |
| 3 | N | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の次数 |
| 4 | IERR | I | 1 | 出 力 | エラーインディケータ |

(4) **制限条件**

(a) $0 < \mathrm{N} \leq \mathrm{LNA}$

(5) **エラーインディケータ**

| IERR の値 | 意　　味 | 処 理 内 容 |
|---|---|---|
| 0 | 正常終了. | |
| 1000 | N = 1 であった. | 配列 A の内容は変更されない. |
| 2100 | 係数行列 A の $\mathrm{U^TDU}$ 分解の処理において, 対角要素が 0 に近いものがあった. 分解行列を使って求解もしくは逆行列を計算する場合, 精度の良い結果が得られない場合がある. | 処理を続ける. |
| 3000 | 制限条件 (a) を満足しなかった. | 処理を打ち切る. |
| $4000 + i$ | $i$ 段目の処理において, 対角要素が 0.0 となった. $A$ は特異である. | |

(6) **注意事項**

(a) 配列 A には, 下三角行列 $U^T$ のみが格納される. $U^T$ の対角成分はその逆数が符号をかえて格納される. 対角行列 $D$, および上三角行列 $U$ は $U^T$ より算出されるので, 配列 A には格納されない (2.8.1 図 2−8 参照).

## 2.8.3 DBSNLS, RBSNLS
## 連立 1 次方程式 ($U^TDU$ 分解後の実対称行列) (軸選択なし)

(1) **機 能**

修正コレスキー法で $U^TDU$ 分解された実対称行列 $A$(2 次元配列型) (下三角型) を係数行列とする連立 1 次方程式を解く.

(2) **使用法**

倍精度サブルーチン:

CALL DBSNLS (A, LNA, N, B, IERR)

単精度サブルーチン:

CALL RBSNLS (A, LNA, N, B, IERR)

(3) **引 数**

D:倍精度実数型　Z:倍精度複素数型　I: {32 ビット整数版では INTEGER(4) / 64 ビット整数版では INTEGER(8)}
R:単精度実数型　C:単精度複素数型

| 項番 | 引数名 | 型 | 大きさ | 入出力 | 内　容 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | A | {D/R} | LNA, N | 入 力 | $U^TDU$ 分解後の係数行列 $A$(実対称行列, 2 次元配列型, 下三角型) (注意事項 (a), (b) 参照) |
| 2 | LNA | I | 1 | 入 力 | 配列 A の整合寸法 |
| 3 | N | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の次数 |
| 4 | B | {D/R} | N | 入 力 | 定数ベクトル$\boldsymbol{b}$ |
| | | | | 出 力 | 解 $\boldsymbol{x}$ |
| 5 | IERR | I | 1 | 出 力 | エラーインディケータ |

(4) **制限条件**

(a) $0 < \mathrm{N} \leq \mathrm{LNA}$

(5) **エラーインディケータ**

| IERR の値 | 意　味 | 処 理 内 容 |
|---|---|---|
| 0 | 正常終了. | |
| 1000 | $\mathrm{N} = 1$ であった. | $\mathrm{B}(1) \leftarrow \mathrm{B}(1)/\mathrm{A}(1,1)$ とする. |
| 3000 | 制限条件 (a) を満足しなかった. | 処理を打ち切る. |

(6) **注意事項**

(a) このサブルーチンを使用するには, 係数行列 $A$ を $\mathrm{U^TDU}$ 分解しておく必要がある. 通常は 2.8.2 $\left\{\begin{matrix}\mathrm{DBSNUD}\\ \mathrm{RBSNUD}\end{matrix}\right\}$を使用して分解する. また, 2.8.1 $\left\{\begin{matrix}\mathrm{DBSNSL}\\ \mathrm{RBSNSL}\end{matrix}\right\}$を使用して同一の係数行列 $A$ を持つ連立 1 次方程式をすでに解いている場合は, その出力として得られる $\mathrm{U^TDU}$ 分解を利用することもできる.

(b) 配列 A には, 下三角行列 $U^T$ が格納されていなければならない. 対角行列 $D$ と上三角行列 $U$ は $U^T$ より算出されるので, 配列 A には格納されていなくてよい. このサブルーチンは配列 A の下三角部分のみを使用する (2.8.1 図 2−8 参照).

## 2.9 エルミート行列 (2 次元配列型) (上三角型) (実数引数型)

### 2.9.1 ZBHPSL, CBHPSL 連立 1 次方程式 (エルミート行列)

(1) **機 能**

エルミート行列 $A$ (2 次元配列型) (上三角型) を係数行列とする連立 1 次方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ を修正コレスキー法を用いて解く.

(2) **使用法**

倍精度サブルーチン:

CALL ZBHPSL (AR, AI, LNA, N, BR, BI, IPVT, W1, IERR)

単精度サブルーチン:

CALL CBHPSL (AR, AI, LNA, N, BR, BI, IPVT, W1, IERR)

(3) **引 数**

D:倍精度実数型　Z:倍精度複素数型　I: { 32 ビット整数版では INTEGER(4) / 64 ビット整数版では INTEGER(8) }
R:単精度実数型　C:単精度複素数型

| 項番 | 引数名 | 型 | 大きさ | 入出力 | 内　容 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | AR | {D/R} | LNA, N | 入 力 | 係数行列 $A$ の実部 (エルミート行列, 2 次元配列型, 上三角型) |
| | | | | 出 力 | $A = LDL^*$ と分解した時の, 上三角行列 $L^*$ の実部 (注意事項 (b) 参照) |
| 2 | AI | {D/R} | LNA, N | 入 力 | 係数行列 $A$ の虚部 (エルミート行列, 2 次元配列型, 上三角型) |
| | | | | 出 力 | $A = LDL^*$ と分解した時の, 上三角行列 $L^*$ の虚部 (注意事項 (b) 参照) |
| 3 | LNA | I | 1 | 入 力 | 配列 AR, AI の整合寸法 |
| 4 | N | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の次数 |
| 5 | BR | {D/R} | N | 入 力 | 定数ベクトル$\boldsymbol{b}$の実部 |
| | | | | 出 力 | 解 $\boldsymbol{x}$ の実部 |
| 6 | BI | {D/R} | N | 入 力 | 定数ベクトル$\boldsymbol{b}$の虚部 |
| | | | | 出 力 | 解 $\boldsymbol{x}$ の虚部 |
| 7 | IPVT | I | N | 出 力 | ピボッティング情報 IPVT(i) :<br>i 段目の処理において行 (列)i と交換した行 (列) の番号 (注意事項 (c) 参照) |
| 8 | W1 | {D/R} | N | ワーク | 作業領域 |
| 9 | IERR | I | 1 | 出 力 | エラーインディケータ |

(4) **制限条件**

(a) $0 < \mathrm{N} \leq \mathrm{LNA}$

(5) **エラーインディケータ**

| IERR の値 | 意　　　　　味 | 処　理　内　容 |
|---|---|---|
| 0 | 正常終了. | |
| 1000 | N=1 であった. | 配列 AR, AI の内容は変更されない.<br>$\mathrm{BR}(1) \leftarrow \mathrm{BR}(1)/\mathrm{AR}(1,1)$,<br>$\mathrm{BI}(1) \leftarrow \mathrm{BI}(1)/\mathrm{AR}(1,1)$ とする. |
| 2100 | 係数行列 A の $\mathrm{LDL}^*$ 分解の処理において, 対角要素が 0 に近いものがあった. 分解行列を使って求解もしくは逆行列を計算する場合, 精度の良い結果が得られない場合がある. | 処理を続ける. |
| 3000 | 制限条件 (a) を満足しなかった. | 処理を打ち切る. |
| $4000+i$ | 係数行列 $A$ の $\mathrm{LDL}^*$ 分解の $i$ 段目の処理において, 対角要素が 0.0 となった.<br>$A$ は特異である. | |

(6) **注意事項**

(a) 定数ベクトル$\boldsymbol{b}$のみが異なる複数の連立 1 次方程式を解く場合には, このサブルーチンを一度使用した後, 続けてサブルーチン 2.9.4 $\begin{Bmatrix} \mathrm{ZBHPLS} \\ \mathrm{CBHPLS} \end{Bmatrix}$ を配列 BR, BI の内容のみを変えて使用すればよい. このようにすれば行列 $A$ の $\mathrm{LDL}^*$ 分解が一度だけしか行われないため, 効率よく解が求まる.

(b) 配列 AR, AI の上三角部分に上三角行列 $L^*$ が格納される. 対角行列 $D$, および下三角行列 $L$ は $L^*$ より算出されるので, 配列 AR, AI には格納されない. 行列 $L$ は行列 $L^*$ の随伴行列であり, 行列 $D$ は行列 $L^*$ の対角要素の逆数を成分とする対角行列である. このサブルーチンは配列 AR, AI の上三角部分のみを使用する. (図 2–9 参照)

(c) このサブルーチンでは, 係数行列 $A$ の $\mathrm{LDL}^*$ 分解時に, 部分軸選択 (partial pivoting) が行われている. 部分軸選択は行と列について対称に行われる. 第 i 段目のピボット行 (列) が第 j 行 (列)$(\mathrm{i} \leq \mathrm{j})$ となった場合, IPVT(i) に j が格納される. また, このとき, 行列 $A$ の第 i 行 (列) と第 j 行 (列) の対応する列 (行) 要素のうち, 第 i 列 (行) から第 n 列 (行) までの要素が実際に交換される.

図 2−9　行列 $L^*$ の格納状態と行列 $D$ の内容

行列 $L^*$

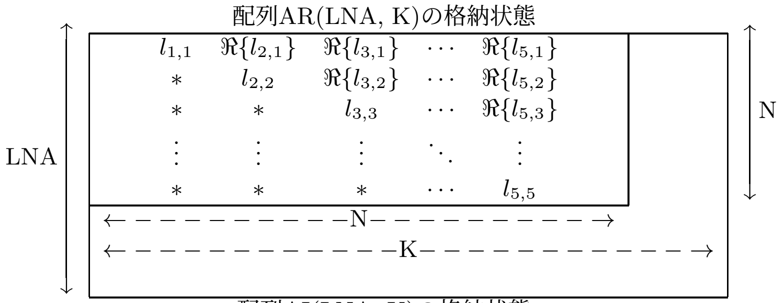
$$\begin{bmatrix} l_{1,1} & l_{2,1} & l_{3,1} & \cdots & l_{5,1} \\ 0.0 & l_{2,2} & l_{3,2} & \cdots & l_{5,2} \\ 0.0 & 0.0 & l_{3,3} & \cdots & l_{5,3} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0.0 & 0.0 & 0.0 & \cdots & l_{5,5} \end{bmatrix}$$

行列 $D$

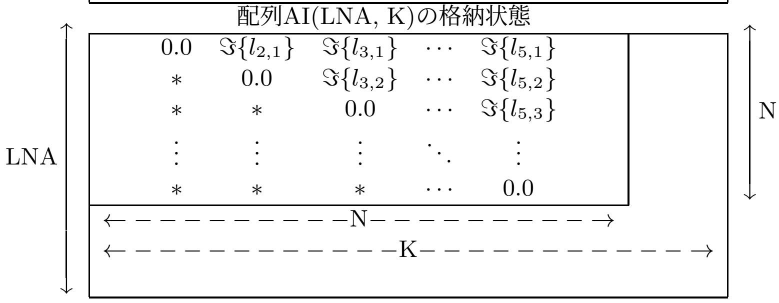
$$\begin{bmatrix} 1/l_{1,1} & 0.0 & 0.0 & \cdots & 0.0 \\ 0.0 & 1/l_{2,2} & 0.0 & \cdots & 0.0 \\ 0.0 & 0.0 & 1/l_{3,3} & \cdots & 0.0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0.0 & 0.0 & 0.0 & \cdots & 1/l_{5,5} \end{bmatrix}$$

$\Downarrow$

配列AR(LNA, K)の格納状態




配列AI(LNA, K)の格納状態




**備　考**

a.　LNA $\geq$ N, N $\leq$ K を満たさなければならない.

b.　$*$ に対応する入力時の値は保証されない.

## (7) **使用例**

(a) 問 題

$$\begin{bmatrix} 9 & 7+3i & 2+5i & 1+i \\ 7-3i & 10 & 3+2i & 2+4i \\ 2-5i & 3-2i & 8 & 5+i \\ 1-i & 2-4i & 5-i & 6 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 10+6i \\ 11+2i \\ 4+6i \\ 4+6i \end{bmatrix}$$

を解く.ただし, $i = \sqrt{-1}$.

(b) 入力データ

係数行列の実部 AR および虚部 AI, LNA $= 11$, N $= 4$, 定数ベクトル $\boldsymbol{b}$

(c) 主プログラム

```
      PROGRAM ABHPSL
!     *** EXAMPLE OF ZBHPSL ***
      IMPLICIT REAL(8) (A-H,O-Z)
      PARAMETER (LNA = 11,LNW = 22)
      DIMENSION AR(LNA,LNA),AI(LNA,LNA),BR(LNA),BI(LNA),W1(LNW)
      DIMENSION IPVT(LNA)
!
      CHARACTER*50      FMT(4)
!
      DATA FMT /'(6X,       4(1X,A1,F5.1,1X,A1,F5.1,1X,A1))',&
               '(6X,  16X, 3(1X,A1,F5.1,1X,A1,F5.1,1X,A1))',&
               '(6X,2(16X),2(1X,A1,F5.1,1X,A1,F5.1,1X,A1))',&
               '(6X,3(16X),  1X,A1,F5.1,1X,A1,F5.1,1X,A1 )'/
!
      READ (5,*) N
      WRITE (6,1000) N
      DO 10 I = 1, N
        READ (5,*) (AR(I,J),AI(I,J),J=I,N)
        WRITE (6,FMT(I)) ('(',AR(I,J),',',AI(I,J),')',J=I,N)
```

```
   10 CONTINUE
      READ (5,*) (BR(I),BI(I),I=1,N)
      WRITE (6,1100)
      DO 20 I = 1, N
      WRITE (6,1200) BR(I),BI(I)
   20 CONTINUE
      WRITE (6,1300)
      CALL ZBHPSL (AR,AI,LNA,N,BR,BI,IPVT,W1,IERR)
      WRITE (6,1400) 'ZBHPSL',IERR
      WRITE (6,1600)
      DO 30 I = 1, N
      WRITE (6,1700) I,BR(I),BI(I)
   30 CONTINUE
      STOP
!
 1000 FORMAT (' ',/,/,' ***  ZBHPSL  ***',/,2X,'**  INPUT  **',&
              /,6X,'N =',I3,&
              /,6X,'COEFFICIENT MATRIX ( REAL, IMAGINARY )')
 1100 FORMAT (6X,'CONSTANT VECTOR ( REAL, IMAGINARY )')
 1200 FORMAT (6X,' (',F5.1,' ,',F5.1,' )')
 1300 FORMAT (2X,'**  OUTPUT  **')
 1400 FORMAT (6X,'IERR (',A6,') =',I5)
 1600 FORMAT (6X,'SOLUTION ( REAL, IMAGINARY )')
 1700 FORMAT (10X,'X(',I2,') = (',D18.10,' ,',D18.10,' )')
      END
```

(d) 出力結果

```
***  ZBHPSL  ***
 **  INPUT  **
     N =  4
     COEFFICIENT MATRIX ( REAL, IMAGINARY )
      (  9.0 ,  0.0 ) (  7.0 ,  3.0 ) (  2.0 ,  5.0 ) (  1.0 ,  1.0 )
                      ( 10.0 ,  0.0 ) (  3.0 ,  2.0 ) (  2.0 ,  4.0 )
                                      (  8.0 ,  0.0 ) (  5.0 ,  1.0 )
                                                      (  6.0 ,  0.0 )
     CONSTANT VECTOR ( REAL, IMAGINARY )
      ( 10.0 ,  6.0 )
      ( 11.0 ,  2.0 )
      (  4.0 ,  6.0 )
      (  4.0 ,  6.0 )
 **  OUTPUT  **
     IERR (ZBHPSL) =    0
     SOLUTION ( REAL, IMAGINARY )
         X( 1) = (  0.1000000000D+01 ,  0.0000000000D+00 )
         X( 2) = (  0.1000000000D+01 ,  0.8881784197D-16 )
         X( 3) = ( -0.4971147871D-16 ,  0.1000000000D+01 )
         X( 4) = ( -0.4170837849D-16 ,  0.1000000000D+01 )
```

### 2.9.2 ZBHPUD, CBHPUD エルミート行列の LDL* 分解

(1) **機 能**

エルミート行列 $A$ (2 次元配列型) (上三角型) を修正コレスキー法を用いて LDL* 分解する.

(2) **使用法**

倍精度サブルーチン:

CALL ZBHPUD (AR, AI, LNA, N, IPVT, W1, IERR)

単精度サブルーチン:

CALL CBHPUD (AR, AI, LNA, N, IPVT, W1, IERR)

(3) **引 数**

D:倍精度実数型　Z:倍精度複素数型　I: {32 ビット整数版では INTEGER(4), 64 ビット整数版では INTEGER(8)}
R:単精度実数型　C:単精度複素数型

| 項番 | 引数名 | 型 | 大きさ | 入出力 | 内　容 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | AR | {D, R} | LNA, N | 入 力 | エルミート行列 $A$ の実部 (2 次元配列型) (上三角型) |
| | | | | 出 力 | $A = LDL^*$ と分解した時の上三角行列 $L^*$ の実部 (注意事項 (a) 参照) |
| 2 | AI | {D, R} | LNA, N | 入 力 | エルミート行列 $A$ の虚部 (2 次元配列型) (上三角型) |
| | | | | 出 力 | $A = LDL^*$ と分解した時の上三角行列 $L^*$ の虚部 (注意事項 (a) 参照) |
| 3 | LNA | I | 1 | 入 力 | 配列 AR, AI の整合寸法 |
| 4 | N | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の次数 |
| 5 | IPVT | I | N | 出 力 | ピボッティング情報 IPVT(i) :<br>i 段目の処理において行 (列)i と交換した行 (列) の番号 (注意事項 (b) 参照) |
| 6 | W1 | {D, R} | N | ワーク | 作業領域 |
| 7 | IERR | I | 1 | 出 力 | エラーインディケータ |

(4) **制限条件**

(a) $0 < \mathrm{N} \leq \mathrm{LNA}$

(5) **エラーインディケータ**

| IERR の値 | 意　　　　　味 | 処　理　内　容 |
|---|---|---|
| 0 | 正常終了. | |
| 1000 | N = 1 であった. | 配列 AR, AI の内容は変更されない. |
| 2100 | 係数行列 A の LDL* 分解の処理において, 対角要素が 0 に近いものがあった. 分解行列を使って求解もしくは逆行列を計算する場合, 精度の良い結果が得られない場合がある. | 処理を続ける. |
| 3000 | 制限条件 (a) を満足しなかった. | 処理を打ち切る. |
| $4000 + i$ | $i$ 段目の処理において, 対角要素が 0.0 となった.<br>$A$ は特異である. | |

(6) **注意事項**

(a) 配列 AR, AI には, 上三角部分に上三角行列 $L^*$ が格納される. 対角行列 $D$, および下三角行列 $L$ は $L^*$ より算出されるので, 配列 AR, AI には格納されない. このサブルーチンは配列 AR, AI の上三角部分のみを使用する (2.9.1 図 2−9 参照).

(b) このサブルーチンでは, 係数行列 $A$ の LDL* 分解時に, 部分軸選択 (partial pivoting) が行われている. 部分軸選択は行と列について対称に行われる. 第 i 段目のピボット行 (列) が第 j 行 (列)(i ≤ j) となった場合, IPVT(i) に j が格納される. また, このとき, 行列 $A$ の第 i 行 (列) と第 j 行 (列) の対応する列 (行) 要素のうち, 第 i 列 (行) から第 n 列 (行) までの要素が実際に交換される.

## 2.9.3 ZBHPUC, CBHPUC
## エルミート行列の LDL* 分解と条件数

(1) **機 能**

エルミート行列 $A$ (2 次元配列型) (上三角型) を修正コレスキー法を用いて LDL* 分解し, 条件数を求める.

(2) **使用法**

倍精度サブルーチン:

CALL ZBHPUC (AR, AI, LNA, N, IPVT, COND, W1, IERR)

単精度サブルーチン:

CALL CBHPUC (AR, AI, LNA, N, IPVT, COND, W1, IERR)

(3) **引 数**

D:倍精度実数型　Z:倍精度複素数型　I: { 32 ビット整数版では INTEGER(4) / 64 ビット整数版では INTEGER(8) }
R:単精度実数型　C:単精度複素数型

| 項番 | 引数名 | 型 | 大きさ | 入出力 | 内　容 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | AR | {D/R} | LNA, N | 入 力 | エルミート行列 $A$ の実部 (2 次元配列型) (上三角型) |
| | | | | 出 力 | $A = LDL^*$ と分解した時の, 上三角行列 $L^*$ の実部 (注意事項 (a) 参照) |
| 2 | AI | {D/R} | LNA, N | 入 力 | エルミート行列 $A$ の虚部 (2 次元配列型) (上三角型) |
| | | | | 出 力 | $A = LDL^*$ と分解した時の, 上三角行列 $L^*$ の虚部 (注意事項 (a) 参照) |
| 3 | LNA | I | 1 | 入 力 | 配列 AR, AI の整合寸法 |
| 4 | N | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の次数 |
| 5 | IPVT | I | N | 出 力 | ピボッティング情報 IPVT(i) :<br>i 段目の処理において行 (列)i と交換した行 (列) の番号 (注意事項 (b) 参照) |
| 6 | COND | {D/R} | 1 | 出 力 | 条件数の逆数 |
| 7 | W1 | {D/R} | $2 \times$ N | ワーク | 作業領域 |
| 8 | IERR | I | 1 | 出 力 | エラーインディケータ |

(4) **制限条件**

(a) $0 < \mathrm{N} \leq \mathrm{LNA}$

(5) **エラーインディケータ**

| IERR の値 | 意　　　　味 | 処　理　内　容 |
|---|---|---|
| 0 | 正常終了. | |
| 1000 | N=1 であった. | 配列 AR, AI の内容は変更されない.<br>COND ← 1.0 とする. |
| 2100 | 係数行列 A の LDL* 分解の処理において, 対角要素が 0 に近いものがあった. 分解行列を使って求解もしくは逆行列を計算する場合, 精度の良い結果が得られない場合がある. | 処理を続ける. |
| 3000 | 制限条件 (a) を満足しなかった. | 処理を打ち切る. |
| $4000+i$ | $i$ 段目の処理において, 対角要素が 0.0 となった.<br>$A$ は特異である. | 処理を打ち切る.<br>条件数は求められない. |

(6) **注意事項**

(a) 配列 AR, AI には, 上三角部分に上三角行列 $L^*$ が格納される. 対角行列 $D$, および下三角行列 $L$ は $L^*$ より算出されるので, 配列 AR, AI には格納されない. このサブルーチンは配列 AR, AI の上三角部分のみを使用する (2.9.1 図 2−9 参照).

(b) このサブルーチンでは, 係数行列 $A$ の LDL* 分解時に, 部分軸選択 (partial pivoting) が行われている. 部分軸選択は行と列について対称に行われる. 第 i 段目のピボット行 (列) が第 j 行 (列)(i ≤ j) となった場合, IPVT(i) に j が格納される. また, このとき, 行列 $A$ の第 i 行 (列) と第 j 行 (列) の対応する列 (行) 要素のうち, 第 i 列 (行) から第 n 列 (行) までの要素が実際に交換される.

(c) 条件数は $\|A\| \cdot \|A^{-1}\|$ で定義されるが, このサブルーチンで求められるのはその概算値である.

### 2.9.4 ZBHPLS, CBHPLS
### 連立 1 次方程式 (LDL* 分解後のエルミート行列)

(1) **機 能**

修正コレスキー法で LDL* 分解されたエルミート行列 $A$ (2 次元配列型) (上三角型) を係数行列とする連立 1 次方程式 $LDL^*\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ を解く.

(2) **使用法**

倍精度サブルーチン:

CALL ZBHPLS (AR, AI, LNA, N, BR, BI, IPVT, IERR)

単精度サブルーチン:

CALL CBHPLS (AR, AI, LNA, N, BR, BI, IPVT, IERR)

(3) **引 数**

D:倍精度実数型　Z:倍精度複素数型
R:単精度実数型　C:単精度複素数型
I: { 32 ビット整数版では INTEGER(4) / 64 ビット整数版では INTEGER(8) }

| 項番 | 引数名 | 型 | 大きさ | 入出力 | 内容 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | AR | {D, R} | LNA, N | 入 力 | LDL* 分解後の係数行列 $A$ の実部 (エルミート行列, 2 次元配列型, 上三角型) (注意事項 (a), (b) 参照) |
| 2 | AI | {D, R} | LNA, N | 入 力 | LDL* 分解後の係数行列 $A$ の虚部 (エルミート行列, 2 次元配列型, 上三角型) (注意事項 (a), (b) 参照) |
| 3 | LNA | I | 1 | 入 力 | 配列 AR, AI の整合寸法 |
| 4 | N | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の次数 |
| 5 | BR | {D, R} | N | 入 力 | 定数ベクトル$\boldsymbol{b}$の実部 |
| | | | | 出 力 | 解$\boldsymbol{x}$の実部 |
| 6 | BI | {D, R} | N | 入 力 | 定数ベクトル$\boldsymbol{b}$の虚部 |
| | | | | 出 力 | 解$\boldsymbol{x}$の虚部 |
| 7 | IPVT | I | N | 入 力 | ピボッティング情報 IPVT(i) : i 段目の処理において行 (列)i と交換した行 (列) の番号 (注意事項 (c) 参照) |
| 8 | IERR | I | 1 | 出 力 | エラーインディケータ |

(4) **制限条件**

(a) $0 < \mathrm{N} \leq \mathrm{LNA}$

(5) **エラーインディケータ**

| IERR の値 | 意味 | 処理内容 |
|---|---|---|
| 0 | 正常終了. | |
| 1000 | N=1 であった. | B(1) ← B(1)/AR(1, 1) とする. |
| 3000 | 制限条件 (a) を満足しなかった. | 処理を打ち切る. |

(6) **注意事項**

(a) このサブルーチンを使用するには, 係数行列 $A$ を LDL* 分解しておく必要がある. 通常は 2.9.2 $\left\{\begin{matrix}\text{ZBHPUD}\\\text{CBHPUD}\end{matrix}\right\}$ を使用して分解するが, 条件数も求めたい場合は 2.9.3 $\left\{\begin{matrix}\text{ZBHPUC}\\\text{CBHPUC}\end{matrix}\right\}$ を使用する. また, 2.9.1 $\left\{\begin{matrix}\text{ZBHPSL}\\\text{CBHPSL}\end{matrix}\right\}$ を使用して同一の係数行列 $A$ を持つ連立 1 次方程式をすでに解いている場合は, その出力として得られる LDL* 分解を利用することもできる. 定数ベクトル $b$ のみが異なる複数の連立 1 次方程式を解く場合には 2.9.5 $\left\{\begin{matrix}\text{ZBHPMS}\\\text{CBHPMS}\end{matrix}\right\}$ を用いて計算する方が効率良く解が求まる.

(b) 配列 AR, AI には, 上三角行列 $L^*$ が格納されていなければならない. 対角行列 $D$ と下三角行列 $L$ は $L^*$ より算出されるので, 配列 AR, AI には格納されていなくてよい.
このサブルーチンは配列 AR, AI の上三角部分のみを使用する.

(c) IPVT には, LDL* 分解時に行った部分軸選択 (partial pivoting) についての情報が格納されていなければならない. この情報は行列 $A$ の $LDL^*$ 分解を行うサブルーチンによって与えられる.

### 2.9.5 ZBHPMS, CBHPMS
### 多重右辺連立 1 次方程式 (LDL* 分解後のエルミート行列)

(1) **機 能**

修正コレスキー法で LDL* 分解されたエルミート行列 $A$ (2 次元配列型) (上三角型) を係数行列とする連立 1 次方程式 $LDL^{*}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b_i}(i = 1, 2, \cdots, m)$ を解く.

(2) **使用法**

倍精度サブルーチン:

CALL ZBHPMS (AR, AI, LNA, N, BR, BI, LNB, M, IPVT, IERR)

単精度サブルーチン:

CALL CBHPMS (AR, AI, LNA, N, BR, BI, LNB, M, IPVT, IERR)

(3) **引 数**

D:倍精度実数型　Z:倍精度複素数型
R:単精度実数型　C:単精度複素数型
I: {32 ビット整数版では INTEGER(4) / 64 ビット整数版では INTEGER(8)}

| 項番 | 引数名 | 型 | 大きさ | 入出力 | 内　　容 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | AR | {D / R} | LNA, N | 入 力 | LDL* 分解後の係数行列 $A$ の実部 (エルミート行列, 2 次元配列型, 上三角型) (注意事項 (a), (b) 参照) |
| 2 | AI | {D / R} | LNA, N | 入 力 | LDL* 分解後の係数行列 $A$ の虚部 (エルミート行列, 2 次元配列型, 上三角型) (注意事項 (a), (b) 参照) |
| 3 | LNA | I | 1 | 入 力 | 配列 AR, AI の整合寸法 |
| 4 | N | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の次数 |
| 5 | BR | {D / R} | LNB, M | 入 力 | 定数ベクトル$\boldsymbol{b}$の実部 |
| | | | | 出 力 | 解$\boldsymbol{x}$の実部 |
| 6 | BI | {D / R} | LNB, M | 入 力 | 定数ベクトル$\boldsymbol{b}$の虚部 |
| | | | | 出 力 | 解$\boldsymbol{x}$の虚部 |
| 7 | LNB | I | 1 | 入 力 | 配列 BR, BI の整合寸法 |
| 8 | M | I | 1 | 入 力 | 右辺ベクトルの数 $m$ |
| 9 | IPVT | I | N | 入 力 | ピボッティング情報 IPVT(i) : i 段目の処理において行 (列)i と交換した行 (列) の番号 (注意事項 (c) 参照) |
| 10 | IERR | I | 1 | 出 力 | エラーインディケータ |

(4) **制限条件**

(a) $0 < \mathrm{N} \leq \mathrm{LNA}, \mathrm{LNB}$

(b) $\mathrm{M} > 0$

(5) **エラーインディケータ**

| IERR の値 | 意　　　味 | 処　理　内　容 |
|---|---|---|
| 0 | 正常終了. | |
| 1000 | N=1 であった. | BR(1, i) ← BR(1, i)/AR(1, 1),<br>BI(1, i) ← BI(1, i)/AR(1, 1)<br>($i = 1, 2, \cdots, m$) とする. |
| 3000 | 制限条件 (a) を満足しなかった. | 処理を打ち切る. |
| 3010 | 制限条件 (b) を満足しなかった. | |

(6) **注意事項**

(a) このサブルーチンを使用するには, 係数行列 $A$ を LDL* 分解しておく必要がある. 通常は2.9.2 $\begin{Bmatrix} \text{ZBHPUD} \\ \text{CBHPUD} \end{Bmatrix}$ を使用して分解するが, 条件数も求めたい場合は2.9.3 $\begin{Bmatrix} \text{ZBHPUC} \\ \text{CBHPUC} \end{Bmatrix}$ を使用する. また, 2.9.1 $\begin{Bmatrix} \text{ZBHPSL} \\ \text{CBHPSL} \end{Bmatrix}$ を使用して同一の係数行列 $A$ を持つ連立 1 次方程式をすでに解いている場合は, その出力として得られる LDL* 分解を利用することもできる.

(b) 配列 AR, AI には, 上三角行列 $L^*$ が格納されていなければならない. 対角行列 $D$ と下三角行列 $L$ は $L^*$ より算出されるので, 配列 AR, AI には格納されていなくてよい.
このサブルーチンは配列 AR, AI の上三角部分のみを使用する.

(c) IPVT には, LDL* 分解時に行った部分軸選択 (partial pivoting) についての情報が格納されていなければならない. この情報は行列 $A$ の LDL* 分解を行うサブルーチンによって与えられる.

(7) **使用例**

(a) 問 題

$$\begin{bmatrix} 9 & 7+3i & 2+5i & 1+1i \\ 7-3i & 10 & 3+2i & 2+4i \\ 2-5i & 3-2i & 8 & 5+1i \\ 1-1i & 2-4i & 5-1i & 6 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_{1,1} & x_{1,2} & x_{1,3} & x_{1,4} \\ x_{2,1} & x_{2,2} & x_{2,3} & x_{2,4} \\ x_{3,1} & x_{3,2} & x_{3,3} & x_{3,4} \\ x_{4,1} & x_{4,2} & x_{4,3} & x_{4,4} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 10+6i & 8+18i & 22i & 2+10i \\ 11+2i & 12+11i & 8+23i & 7+14i \\ 4+6i & 15+5i & 20+6i & 9+7i \\ 4+6i & 8+2i & 16+2i & 12+6i \end{bmatrix}$$

を解く. ただし, $i = \sqrt{-1}$.

(b) 入力データ
LDL* 後の係数行列の $A$, LNA = 11, N = 4, M, 定数ベクトル$\boldsymbol{b_i}(i = 1, 2, \cdots, \mathrm{M})$

(c) 主プログラム

```
      PROGRAM ABHPMS
! *** EXAMPLE OF ZBHPUD, ZBHPMS ***
      IMPLICIT REAL(8) (A-H,O-Z)
      PARAMETER (LNA = 11)
      DIMENSION AR(LNA,LNA),AI(LNA,LNA),&
                BR(LNA,LNA),BI(LNA,LNA),WK(LNA),IPVT(LNA)
!
      READ (5,*) N
      READ (5,*) M
      WRITE (6,1000) N, M
      DO 10 I = 1, N
         READ (5,*) (AR(I,J),AI(I,J),J=I,N)
   10 CONTINUE
      DO 15 I = 1, N
         WRITE(6,1100) (AR(J,I),-AI(J,I), J=1, I-1),&
                       (AR(I,J), AI(I,J), J=I, N)
   15 CONTINUE
      WRITE (6,1200)
      DO 20 J = 1, M
         READ (5,*) (BR(I,J),BI(I,J),I=1,N)
   20 CONTINUE
      DO 25 I = 1, N
```

```
            WRITE (6,1100) (BR(I,J),BI(I,J),J=1,M)
   25 CONTINUE
      WRITE (6,1300)
      CALL ZBHPUD (AR,AI,LNA,N,IPVT,WK,IERR)
      WRITE (6,1400) 'ZBHPUD',IERR
      CALL ZBHPMS (AR,AI,LNA,N,BR,BI,LNA,M,IPVT,JERR)
      WRITE (6,1400) 'ZBHPMS',JERR
      IF (IERR .GE. 3000) STOP
      WRITE (6,1600)
      DO 30 I = 1, N
         WRITE (6,1100) (BR(I,J),BI(I,J),J=1,M)
   30 CONTINUE
      STOP
!
 1000 FORMAT(1X,/,/,&
             1X ,'***  ZBHPUD, ZBHPMS  ***',/,/,&
             1X,1X,'**  INPUT  **',/,/,&
             1X,5X,'N =',I3,/,&
             1X,5X,'M =',I3,/,&
             /,1X,5X,'COEFFICIENT MATRIX')
 1100 FORMAT(1X,6X,4('(',F8.4,',',F8.4,')'))
 1200 FORMAT(/,1X,5X,'CONSTANT VECTORS')
 1300 FORMAT(/,1X,1X,'**  OUTPUT  **',/)
 1400 FORMAT(1X,5X,'ERR (',A6,') =',I5)
 1600 FORMAT(/,1X,5X,'SOLUTION')
      END
```

(d) 出力結果

```
 ***  ZBHPUD, ZBHPMS  ***

  **  INPUT  **

      N =  4
      M =  4

      COEFFICIENT MATRIX
       (  9.0000,  0.0000)(  7.0000,  3.0000)(  2.0000,  5.0000)(  1.0000,  1.0000)
       (  7.0000, -3.0000)( 10.0000,  0.0000)(  3.0000,  2.0000)(  2.0000,  4.0000)
       (  2.0000, -5.0000)(  3.0000, -2.0000)(  8.0000,  0.0000)(  5.0000,  1.0000)
       (  1.0000, -1.0000)(  2.0000, -4.0000)(  5.0000, -1.0000)(  6.0000,  0.0000)

      CONSTANT VECTORS
       ( 10.0000,  6.0000)(  8.0000, 18.0000)(  0.0000, 22.0000)(  2.0000, 10.0000)
       ( 11.0000,  2.0000)( 12.0000, 11.0000)(  8.0000, 23.0000)(  7.0000, 14.0000)
       (  4.0000,  6.0000)( 15.0000,  5.0000)( 20.0000,  6.0000)(  9.0000,  7.0000)
       (  4.0000,  6.0000)(  8.0000,  2.0000)( 16.0000,  2.0000)( 12.0000,  6.0000)

  **  OUTPUT  **

      ERR (ZBHPUD) =    0
      ERR (ZBHPMS) =    0

      SOLUTION
       (  1.0000,  0.0000)( -0.0000,  1.0000)(  0.0000,  1.0000)(  1.0000,  0.0000)
       (  1.0000,  0.0000)(  1.0000, -0.0000)( -0.0000,  1.0000)(  0.0000,  1.0000)
       ( -0.0000,  1.0000)(  1.0000, -0.0000)(  1.0000,  0.0000)(  0.0000,  1.0000)
       ( -0.0000,  1.0000)(  0.0000,  1.0000)(  1.0000, -0.0000)(  1.0000, -0.0000)
```

## 2.9.6 ZBHPDI, CBHPDI エルミート行列の行列式と逆行列

(1) **機 能**

修正コレスキー法で $LDL^*$ 分解されたエルミート行列 $A$ (2 次元配列型) (上三角型) の行列式と逆行列を求める.

(2) **使用法**

倍精度サブルーチン:

CALL ZBHPDI (AR, AI, LNA, N, IPVT, DET, ISW, W1, IERR)

単精度サブルーチン:

CALL CBHPDI (AR, AI, LNA, N, IPVT, DET, ISW, W1, IERR)

(3) **引 数**

D:倍精度実数型 Z:倍精度複素数型
R:単精度実数型 C:単精度複素数型
I: {32 ビット整数版では INTEGER(4) / 64 ビット整数版では INTEGER(8)}

| 項番 | 引数名 | 型 | 大きさ | 入出力 | 内容 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | AR | {D / R} | LNA, N | 入 力 | $LDL^*$ 分解後のエルミート行列 $A$ の実部 (2 次元配列型)(上三角型) (注意事項 (a), (b) 参照) |
| | | | | 出 力 | 行列 $A$ の逆行列の実部 (注意事項 (b) 参照) |
| 2 | AI | {D / R} | LNA, N | 入 力 | $LDL^*$ 分解後のエルミート行列 $A$ の虚部 (2 次元配列型)(上三角型) (注意事項 (a), (b) 参照) |
| | | | | 出 力 | 行列 $A$ の逆行列の虚部 (注意事項 (b) 参照) |
| 3 | LNA | I | 1 | 入 力 | 配列 AR, AI の整合寸法 |
| 4 | N | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の次数 |
| 5 | IPVT | I | N | 入 力 | ピボッティング情報 IPVT(i) :<br>i 段目の処理において行 (列)i と交換した行 (列) の番号 (注意事項 (d) 参照) |
| 6 | DET | {D / R} | 2 | 出 力 | 行列 $A$ の行列式の値 (注意事項 (c) 参照) |
| 7 | ISW | I | 1 | 入 力 | 処理スイッチ<br>ISW>0:行列式の値を求める.<br>ISW=0:行列式の値と逆行列を求める.<br>ISW<0:逆行列を求める. |
| 8 | W1 | {D / R} | N | ワーク | 作業領域 |
| 9 | IERR | I | 1 | 出 力 | エラーインディケータ |

(4) **制限条件**

(a) $0 < N \leq LNA$

(5) **エラーインディケータ**

| IERR の値 | 意　　　味 | 処　理　内　容 |
|---|---|---|
| 0 | 正常終了. | |
| 1000 | N = 1 であった. | DET(1) ← A(1, 1)<br>DET(2) ← 0.0<br>AR(1, 1) ← 1.0/AR(1, 1) とする. |
| 3000 | 制限条件 (a) を満足しなかった. | 処理を打ち切る. |

(6) **注意事項**

(a) このサブルーチンを使用するには, 係数行列 $A$ を LDL* 分解しておく必要がある.
分解は, 2.9.2 $\begin{Bmatrix}\text{ZBHPUD}\\\text{CBHPUD}\end{Bmatrix}$, 2.9.3 $\begin{Bmatrix}\text{ZBHPUC}\\\text{CBHPUC}\end{Bmatrix}$, 2.9.1 $\begin{Bmatrix}\text{ZBHPSL}\\\text{CBHPSL}\end{Bmatrix}$のいずれかで行えばよい.

(b) 配列 AR, AI には, 上三角行列 $L^*$ が格納されていなければならない. 対角行列 $D$, および下三角行列 $L$ は $L^*$ より算出されるので, 配列 AR, AI には格納されなくてよい. 逆行列 $A^{-1}$ はやはりエルミート行列であるので, 上三角部分のみが $A$ に格納される.
このサブルーチンは配列 AR, AI の上三角部分のみを使用する (2.9.1 図 2−9 参照).

(c) 行列式の値は次の式で与えられる.
$det(A) = \text{DET}(1) \times 10^{\text{DET}(2)}$
このとき, $1.0 \leq |\text{DET}(1)| < 10.0$ となるようにスケーリングされている.

(d) IPVT には, LDL* 分解時に行った部分軸選択 (partial pivoting) についての情報が格納されていなければならない. この情報は行列 $A$ の $LDL^*$ 分解を行うサブルーチンによって与えられる.

(e) **行列の次数が 100 以下など十分に小さい場合や, 逆行列そのものが必要である場合を除いて, 逆行列を計算すべきではない.** 数値計算では多くの場合, 逆行列は, $A^{-1}\boldsymbol{b}$ や $A^{-1}B$ といった形式で現れるが, これらはそれぞれ, ベクトル $\boldsymbol{x}$ についての連立 1 次方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$, 行列 $X$ についての多重右辺連立 1 次方程式 $AX = B$ として連立 1 次方程式を解いて計算すべきである. 数学的には, 逆行列を求めて逆行列とベクトルの積や逆行列と行列の積を計算することと前述のような連立 1 次方程式を解くことは同じであるが, 数値計算上は一般に, 逆行列による求解は計算効率も悪く, 計算精度も劣る.

## 2.9.7 ZBHPLX, CBHPLX
## 連立 1 次方程式の解の改良 (エルミート行列)

(1) **機 能**

エルミート行列 $A$ (2 次元配列型) (上三角型) を係数行列とする連立 1 次方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ の解を反復法により改良する.

(2) **使用法**

倍精度サブルーチン:

CALL ZBHPLX (AR, AI, LNA, N, ALR, ALI, BR, BI, XR, XI, ITOL, NIT, IPVT, W1, IERR)

単精度サブルーチン:

CALL CBHPLX (AR, AI, LNA, N, ALR, ALI, BR, BI, XR, XI, ITOL, NIT, IPVT, W1, IERR)

(3) **引 数**

D:倍精度実数型　Z:倍精度複素数型　I: {32 ビット整数版では INTEGER(4) / 64 ビット整数版では INTEGER(8)}
R:単精度実数型　C:単精度複素数型

| 項番 | 引数名 | 型 | 大きさ | 入出力 | 内　容 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | AR | {D/R} | LNA, N | 入 力 | 係数行列 $A$ の実部 (エルミート行列, 2 次元配列型, 上三角型) |
| 2 | AI | {D/R} | LNA, N | 入 力 | 係数行列 $A$ の虚部 (エルミート行列, 2 次元配列型, 上三角型) |
| 3 | LNA | I | 1 | 入 力 | 配列 AR, AI, ALR, ALI の整合寸法 |
| 4 | N | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の次数 |
| 5 | ALR | {D/R} | LNA, N | 入 力 | LDL* 分解後の係数行列 $A$ の実部 (注意事項 (a) 参照) |
| 6 | ALI | {D/R} | LNA, N | 入 力 | LDL* 分解後の係数行列 $A$ の虚部 (注意事項 (a) 参照) |
| 7 | BR | {D/R} | N | 入 力 | 定数ベクトル $\boldsymbol{b}$ の実部 |
| 8 | BI | {D/R} | N | 入 力 | 定数ベクトル $\boldsymbol{b}$ の虚部 |
| 9 | XR | {D/R} | N | 入 力 | 近似解 $\boldsymbol{x}$ の実部 |
| | | | | 出 力 | 反復改良された解 $\boldsymbol{x}$ の実部 |
| 10 | XI | {D/R} | N | 入 力 | 近似解 $\boldsymbol{x}$ の虚部 |
| | | | | 出 力 | 反復改良された解 $\boldsymbol{x}$ の虚部 |
| 11 | ITOL | I | 1 | 入 力 | 反復改良したい桁数 (注意事項 (b) 参照) |
| | | | | 出 力 | 反復改良された桁数の近似値 (注意事項 (c) 参照) |
| 12 | NIT | I | 1 | 入 力 | 最大反復回数 (注意事項 (d) 参照) |
| 13 | IPVT | I | N | 入 力 | ピボッティング情報 (注意事項 (a) 参照) |

| 項番 | 引数名 | 型 | 大きさ | 入出力 | 内　　容 |
|---|---|---|---|---|---|
| 14 | W1 | $\begin{Bmatrix} \mathrm{D} \\ \mathrm{R} \end{Bmatrix}$ | $3 \times \mathrm{N}$ | ワーク | 作業領域 |
| 15 | IERR | I | 1 | 出 力 | エラーインディケータ |

(4) **制限条件**

(a) $0 < \mathrm{N} \leq \mathrm{LNA}$

(5) **エラーインディケータ**

| IERR の値 | 意　　味 | 処 理 内 容 |
|---|---|---|
| 0 | 正常終了. | |
| 1000 | N=1 であった. | 解は改良されない. |
| 3000 | 制限条件 (a) を満足しなかった. | 処理を打ち切る. |
| 5000 | 最大反復回数以内で収束しなかった. | ITOL の出力値を計算し, 処理を打ち切る. |
| 6000 | 解を改良できなかった. | |

(6) **注意事項**

(a) このサブルーチンは, 2.9.1 $\begin{Bmatrix} \mathrm{ZBHPSL} \\ \mathrm{CBHPSL} \end{Bmatrix}$ または 2.9.4 $\begin{Bmatrix} \mathrm{ZBHPLS} \\ \mathrm{CBHPLS} \end{Bmatrix}$ によって得られた解を, さらに改良するものである. 従って, 入力として 2.9.1 $\begin{Bmatrix} \mathrm{ZBHPSL} \\ \mathrm{CBHPSL} \end{Bmatrix}$, 2.9.2 $\begin{Bmatrix} \mathrm{ZBHPUD} \\ \mathrm{CBHPUD} \end{Bmatrix}$ または 2.9.3 $\begin{Bmatrix} \mathrm{ZBHPUC} \\ \mathrm{CBHPUC} \end{Bmatrix}$ によって分解された係数行列 $A$ とその時得られたピボッティング情報を与えなければならない.

(b) 解の改良は, 解の上位 ITOL 桁が修正されなくなるまで反復される. ただし, 以下の条件を満たす場合は, 解の修正が下位 1 ビット以下になるまで反復される.
ITOL $\leq 0$ または ITOL $\geq -$ LOG10 $(2 \times \varepsilon)$ ($\varepsilon$ : 誤差判定のための単位)

(c) 反復回数以内で, 要求された桁数が収束しなかった場合, 修正されなくなった桁数の近似値が ITOL に返される.

(d) NIT の入力値が 0 以下の場合, 既定値として 40 がとられる.

## 2.10 エルミート行列 (2 次元配列型) (上三角型) (実数引数型) (軸選択なし)

### 2.10.1 ZBHRSL, CBHRSL<br>連立 1 次方程式 (エルミート行列) (軸選択なし)

(1) **機 能**

エルミート行列 $A$ (2 次元配列型) (上三角型) を係数行列とする連立 1 次方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ を修正コレスキー法を用いて解く.

(2) **使用法**

倍精度サブルーチン:

CALL ZBHRSL (AR, AI, LNA, N, BR, BI, W1, IERR)

単精度サブルーチン:

CALL CBHRSL (AR, AI, LNA, N, BR, BI, W1, IERR)

(3) **引 数**

D:倍精度実数型　Z:倍精度複素数型　I: {32 ビット整数版では INTEGER(4) / 64 ビット整数版では INTEGER(8)}<br>
R:単精度実数型　C:単精度複素数型

| 項番 | 引数名 | 型 | 大きさ | 入出力 | 内　容 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | AR | {D/R} | LNA, N | 入 力 | 係数行列 $A$ の実部 (エルミート行列, 2 次元配列型, 上三角型) |
| | | | | 出 力 | $A = LDL^*$ と分解した時の, 上三角行列 $L^*$ の実部 (注意事項 (b) 参照) |
| 2 | AI | {D/R} | LNA, N | 入 力 | 係数行列 $A$ の虚部 (エルミート行列, 2 次元配列型, 上三角型) |
| | | | | 出 力 | $A = LDL^*$ と分解した時の, 上三角行列 $L^*$ の虚部 (注意事項 (b) 参照) |
| 3 | LNA | I | 1 | 入 力 | 配列 AR, AI の整合寸法 |
| 4 | N | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の次数 |
| 5 | BR | {D/R} | N | 入 力 | 定数ベクトル$\boldsymbol{b}$の実部 |
| | | | | 出 力 | 解 $\boldsymbol{x}$ の実部 |
| 6 | BI | {D/R} | N | 入 力 | 定数ベクトル$\boldsymbol{b}$の虚部 |
| | | | | 出 力 | 解 $\boldsymbol{x}$ の虚部 |
| 7 | W1 | {D/R} | 2 × N | ワーク | 作業領域 |
| 8 | IERR | I | 1 | 出 力 | エラーインディケータ |

(4) **制限条件**

(a) $0 < \mathrm{N} \leq \mathrm{LNA}$

## (5) エラーインディケータ

| IERR の値 | 意　　　味 | 処　理　内　容 |
|---|---|---|
| 0 | 正常終了. | |
| 1000 | N=1 であった. | 配列 AR, AI の内容は変更されない.<br>BR(1) ← BR(1)/AR(1, 1),<br>BI(1) ← BI(1)/AR(1, 1) とする. |
| 2100 | 係数行列 A の LDL* 分解の処理において, 対角要素が 0 に近いものがあった. 分解行列を使って求解もしくは逆行列を計算する場合, 精度の良い結果が得られない場合がある. | 処理を続ける. |
| 3000 | 制限条件 (a) を満足しなかった. | 処理を打ち切る. |
| $4000+i$ | 係数行列 $A$ の LDL* 分解の $i$ 段目の処理において, 対角要素が 0.0 となった.<br>$A$ は特異である. | |

## (6) 注意事項

(a) 定数ベクトル$\boldsymbol{b}$のみが異なる複数の連立 1 次方程式を解く場合には, このサブルーチンを一度使用した後, 続けてサブルーチン 2.10.4 $\left\{\begin{matrix}\text{ZBHRLS}\\\text{CBHRLS}\end{matrix}\right\}$ を配列 BR, BI の内容のみを変えて使用すればよい. このようにすれば行列 $A$ の LDL* 分解が一度だけしか行われないため, 効率よく解が求まる.

(b) 配列 AR, AI の上三角部分に上三角行列 $L^*$ が格納される. 対角行列 $D$, および下三角行列 $L$ は $L^*$ より算出されるので, 配列 AR, AI には格納されない. 行列 $L$ は行列 $L^*$ の随伴行列であり, 行列 $D$ は行列 $L^*$ の対角要素の逆数を成分とする対角行列である. このサブルーチンは配列 AR, AI の上三角部分のみを使用する. (図 2−10 参照)

図 2−10　行列 $L^*$ の格納状態と行列 $D$ の内容

$$
\text{行列 } L^* \quad
\begin{bmatrix}
l_{1,1} & l_{2,1} & l_{3,1} & \cdots & l_{5,1} \\
0.0 & l_{2,2} & l_{3,2} & \cdots & l_{5,2} \\
0.0 & 0.0 & l_{3,3} & \cdots & l_{5,3} \\
\vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
0.0 & 0.0 & 0.0 & \cdots & l_{5,5}
\end{bmatrix}
\qquad
\text{行列 } D \quad
\begin{bmatrix}
1/l_{1,1} & 0.0 & 0.0 & \cdots & 0.0 \\
0.0 & 1/l_{2,2} & 0.0 & \cdots & 0.0 \\
0.0 & 0.0 & 1/l_{3,3} & \cdots & 0.0 \\
\vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
0.0 & 0.0 & 0.0 & \cdots & 1/l_{5,5}
\end{bmatrix}
$$

$$\Downarrow$$

配列AR(LNA, K)の格納状態

$$
\text{LNA} \quad
\begin{array}{ccccc}
l_{1,1} & \Re\{l_{2,1}\} & \Re\{l_{3,1}\} & \cdots & \Re\{l_{5,1}\} \\
* & l_{2,2} & \Re\{l_{3,2}\} & \cdots & \Re\{l_{5,2}\} \\
* & * & l_{3,3} & \cdots & \Re\{l_{5,3}\} \\
\vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
* & * & * & \cdots & l_{5,5}
\end{array}
\quad \text{N}
$$

$\longleftarrow$ − − − − − − − − − − N − − − − − − − − − − $\longrightarrow$

$\longleftarrow$ − − − − − − − − − − − − K − − − − − − − − − − − − $\longrightarrow$

配列AI(LNA, K)の格納状態

$$
\text{LNA} \quad
\begin{array}{ccccc}
0.0 & \Im\{l_{2,1}\} & \Im\{l_{3,1}\} & \cdots & \Im\{l_{5,1}\} \\
* & 0.0 & \Im\{l_{3,2}\} & \cdots & \Im\{l_{5,2}\} \\
* & * & 0.0 & \cdots & \Im\{l_{5,3}\} \\
\vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
* & * & * & \cdots & 0.0
\end{array}
\quad \text{N}
$$

$\longleftarrow$ − − − − − − − − − − N − − − − − − − − − − $\longrightarrow$

$\longleftarrow$ − − − − − − − − − − − − K − − − − − − − − − − − − $\longrightarrow$

**備　考**

a.　LNA $\geq$ N, N $\leq$ K を満たさなければならない.

b.　$*$ に対応する入力時の値は保証されない.

## (7) 使用例

(a) 問 題

$$
\begin{bmatrix}
9 & 7+3i & 2+5i & 1+i \\
7-3i & 10 & 3+2i & 2+4i \\
2-5i & 3-2i & 8 & 5+i \\
1-i & 2-4i & 5-i & 6
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix}
=
\begin{bmatrix} 10+6i \\ 11+2i \\ 4+6i \\ 4+6i \end{bmatrix}
$$

を解く.ただし, $i = \sqrt{-1}$.

(b) 入力データ

係数行列の実部 AR および虚部 AI, LNA = 11, N = 4, 定数ベクトル $\boldsymbol{b}$

(c) 主プログラム

```
      PROGRAM ABHRSL
!     *** EXAMPLE OF ZBHRUC,ZBHRLS ***
      IMPLICIT REAL(8) (A-H,O-Z)
      PARAMETER (LNA = 11,LNW = 22)
      DIMENSION AR(LNA,LNA),AI(LNA,LNA),BR(LNA),BI(LNA),W1(LNW)
!
      CHARACTER*50      FMT(4)
!
      DATA FMT /'(6X,       4(1X,A1,F5.1,1X,A1,F5.1,1X,A1))',&
                '(6X,  16X, 3(1X,A1,F5.1,1X,A1,F5.1,1X,A1))',&
                '(6X,2(16X),2(1X,A1,F5.1,1X,A1,F5.1,1X,A1))',&
                '(6X,3(16X),  1X,A1,F5.1,1X,A1,F5.1,1X,A1 )'/
!
      READ (5,*) N
      WRITE (6,1000) N
      DO 10 I = 1, N
        READ (5,*) (AR(I,J),AI(I,J),J=I,N)
        WRITE (6,FMT(I)) ('(',AR(I,J),',',AI(I,J),')',J=I,N)
   10 CONTINUE
```

```
      READ (5,*) (BR(I),BI(I),I=1,N)
      WRITE (6,1100)
      DO 20 I = 1, N
      WRITE (6,1200) BR(I),BI(I)
   20 CONTINUE
      WRITE (6,1300)
      CALL ZBHRUC (AR,AI,LNA,N,COND,W1,IERR)
      WRITE (6,1400) 'ZBHRUC',IERR
      IF (IERR .GE. 3000) STOP
      COND = 1.0D0/COND
      CALL ZBHRLS (AR,AI,LNA,N,BR,BI,KERR)
      WRITE (6,1400) 'ZBHRLS',KERR
      WRITE (6,1500) COND
      WRITE (6,1600)
      DO 30 I = 1, N
      WRITE (6,1700) I,BR(I),BI(I)
   30 CONTINUE
      STOP
!
 1000 FORMAT (' ',/,/,' ***  ZBHRUC,ZBHRLS  ***',/,2X,'**  INPUT  **',&
             /,6X,'N =',I3,&
             /,6X,'COEFFICIENT MATRIX ( REAL, IMAGINARY )')
 1100 FORMAT (6X,'CONSTANT VECTOR ( REAL, IMAGINARY )')
 1200 FORMAT (6X,' (',F5.1,' ,',F5.1,' )')
 1300 FORMAT (2X,'**  OUTPUT  **')
 1400 FORMAT (6X,'IERR (',A6,') =',I5)
 1500 FORMAT (6X,'CONDITION NUMBER =',D18.10)
 1600 FORMAT (6X,'SOLUTION ( REAL, IMAGINARY )')
 1700 FORMAT (10X,'X(',I2,') = (',D18.10,' ,',D18.10,' )')
      END
```

(d) 出力結果

```
 ***  ZBHRUC,ZBHRLS  ***
  **  INPUT  **
      N =  4
      COEFFICIENT MATRIX ( REAL, IMAGINARY )
       (  9.0 ,  0.0 ) (  7.0 ,  3.0 ) (  2.0 ,  5.0 ) (  1.0 ,  1.0 )
                       ( 10.0 ,  0.0 ) (  3.0 ,  2.0 ) (  2.0 ,  4.0 )
                                       (  8.0 ,  0.0 ) (  5.0 ,  1.0 )
                                                       (  6.0 ,  0.0 )
      CONSTANT VECTOR ( REAL, IMAGINARY )
       ( 10.0 ,  6.0 )
       ( 11.0 ,  2.0 )
       (  4.0 ,  6.0 )
       (  4.0 ,  6.0 )
  **  OUTPUT  **
      IERR (ZBHRUC) =    0
      IERR (ZBHRLS) =    0
      CONDITION NUMBER =  0.2998721749D+02
      SOLUTION ( REAL, IMAGINARY )
          X( 1) = (  0.1000000000D+01 ,  0.0000000000D+00 )
          X( 2) = (  0.1000000000D+01 ,  0.5464378949D-16 )
          X( 3) = ( -0.1022363649D-15 ,  0.1000000000D+01 )
          X( 4) = ( -0.4170837849D-16 ,  0.1000000000D+01 )
```

## 2.10.2 ZBHRUD, CBHRUD エルミート行列の LDL* 分解 (軸選択なし)

(1) **機 能**

エルミート行列 $A$ (2 次元配列型) (上三角型) を修正コレスキー法を用いて LDL* 分解する.

(2) **使用法**

倍精度サブルーチン:

CALL ZBHRUD (AR, AI, LNA, N, W1, IERR)

単精度サブルーチン:

CALL CBHRUD (AR, AI, LNA, N, W1, IERR)

(3) **引 数**

D:倍精度実数型　Z:倍精度複素数型
R:単精度実数型　C:単精度複素数型
I: { 32 ビット整数版では INTEGER(4) / 64 ビット整数版では INTEGER(8) }

| 項番 | 引数名 | 型 | 大きさ | 入出力 | 内　容 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | AR | {D / R} | LNA, N | 入 力 | エルミート行列 $A$ の実部 (2 次元配列型) (上三角型) |
| | | | | 出 力 | $A = LDL^*$ と分解した時の上三角行列 $L^*$ の実部 (注意事項 (a) 参照) |
| 2 | AI | {D / R} | LNA, N | 入 力 | エルミート行列 $A$ の虚部 (2 次元配列型) (上三角型) |
| | | | | 出 力 | $A = LDL^*$ と分解した時の上三角行列 $L^*$ の虚部 (注意事項 (a) 参照) |
| 3 | LNA | I | 1 | 入 力 | 配列 AR, AI の整合寸法 |
| 4 | N | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の次数 |
| 5 | W1 | {D / R} | 2 × N | ワーク | 作業領域 |
| 6 | IERR | I | 1 | 出 力 | エラーインディケータ |

(4) **制限条件**

(a) $0 < \mathrm{N} \leq \mathrm{LNA}$

(5) **エラーインディケータ**

| IERR の値 | 意　　　味 | 処　理　内　容 |
|---|---|---|
| 0 | 正常終了. | |
| 1000 | N = 1 であった. | 配列 AR, AI の内容は変更されない. |
| 2100 | 係数行列 A の LDL* 分解の処理において, 対角要素が 0 に近いものがあった. 分解行列を使って求解もしくは逆行列を計算する場合, 精度の良い結果が得られない場合がある. | 処理を続ける. |
| 3000 | 制限条件 (a) を満足しなかった. | 処理を打ち切る. |
| $4000+i$ | $i$ 段目の処理において, 対角要素が 0.0 となった.<br>$A$ は特異である. | |

(6) **注意事項**

(a) 配列 AR, AI には, 上三角部分に上三角行列 $L^*$ が格納される. 対角行列 $D$, および下三角行列 $L$ は $L^*$ より算出されるので, 配列 AR, AI には格納されない. このサブルーチンは配列 AR, AI の上三角部分のみを使用する (2.10.1　図 2−10 参照).

### 2.10.3 ZBHRUC, CBHRUC エルミート行列の LDL* 分解と条件数 (軸選択なし)

(1) **機 能**

エルミート行列 $A$ (2 次元配列型) (上三角型) を修正コレスキー法を用いて LDL* 分解し, 条件数を求める.

(2) **使用法**

倍精度サブルーチン:

CALL ZBHRUC (AR, AI, LNA, N, COND, W1, IERR)

単精度サブルーチン:

CALL CBHRUC (AR, AI, LNA, N, COND, W1, IERR)

(3) **引 数**

D:倍精度実数型　Z:倍精度複素数型　I: {32 ビット整数版では INTEGER(4), 64 ビット整数版では INTEGER(8)}
R:単精度実数型　C:単精度複素数型

| 項番 | 引数名 | 型 | 大きさ | 入出力 | 内容 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | AR | {D, R} | LNA, N | 入 力 | エルミート行列 $A$ の実部 (2 次元配列型) (上三角型) |
| | | | | 出 力 | $A = LDL^*$ と分解した時の, 上三角行列 $L^*$ の実部 (注意事項 (a) 参照) |
| 2 | AI | {D, R} | LNA, N | 入 力 | エルミート行列 $A$ の虚部 (2 次元配列型) (上三角型) |
| | | | | 出 力 | $A = LDL^*$ と分解した時の, 上三角行列 $L^*$ の虚部 (注意事項 (a) 参照) |
| 3 | LNA | I | 1 | 入 力 | 配列 AR, AI の整合寸法 |
| 4 | N | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の次数 |
| 5 | COND | {D, R} | 1 | 出 力 | 条件数の逆数 |
| 6 | W1 | {D, R} | $2 \times$ N | ワーク | 作業領域 |
| 7 | IERR | I | 1 | 出 力 | エラーインディケータ |

(4) **制限条件**

(a) $0 <$ N $\leq$ LNA

(5) **エラーインディケータ**

| IERR の値 | 意　　　味 | 処　理　内　容 |
|---|---|---|
| 0 | 正常終了. | |
| 1000 | N=1 であった. | 配列 AR, AI の内容は変更されない.<br>COND ← 1.0 とする. |
| 2100 | 係数行列 A の LDL* 分解の処理において, 対角要素が 0 に近いものがあった. 分解行列を使って求解もしくは逆行列を計算する場合, 精度の良い結果が得られない場合がある. | 処理を続ける. |
| 3000 | 制限条件 (a) を満足しなかった. | 処理を打ち切る. |
| $4000+i$ | $i$ 段目の処理において, 対角要素が 0.0 となった.<br>$A$ は特異である. | 処理を打ち切る.<br>条件数は求められない. |

(6) **注意事項**

(a) 配列 AR, AI には, 上三角部分に上三角行列 $L^*$ が格納される. 対角行列 $D$, および下三角行列 $L$ は $L^*$ より算出されるので, 配列 AR, AI には格納されない. このサブルーチンは配列 AR, AI の上三角部分のみを使用する (2.10.1 図 2−10 参照).

(b) 条件数は $\|A\|\cdot\|A^{-1}\|$ で定義されるが, このサブルーチンで求められるのはその概算値である.

## 2.10.4 ZBHRLS, CBHRLS
## 連立 1 次方程式 (LDL* 分解後のエルミート行列) (軸選択なし)

(1) **機 能**

修正コレスキー法で LDL* 分解されたエルミート行列 $A$ (2 次元配列型) (上三角型) を係数行列とする連立 1 次方程式 $LDL^*\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ を解く.

(2) **使用法**

倍精度サブルーチン:

CALL ZBHRLS (AR, AI, LNA, N, BR, BI, IERR)

単精度サブルーチン:

CALL CBHRLS (AR, AI, LNA, N, BR, BI, IERR)

(3) **引 数**

D:倍精度実数型　Z:倍精度複素数型　I: { 32 ビット整数版では INTEGER(4) / 64 ビット整数版では INTEGER(8) }
R:単精度実数型　C:単精度複素数型

| 項番 | 引数名 | 型 | 大きさ | 入出力 | 内　容 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | AR | {D / R} | LNA, N | 入 力 | LDL* 分解後の係数行列 $A$ の実部 (エルミート行列, 2 次元配列型, 上三角型) (注意事項 (a), (b) 参照) |
| 2 | AI | {D / R} | LNA, N | 入 力 | LDL* 分解後の係数行列 $A$ の虚部 (エルミート行列, 2 次元配列型, 上三角型) (注意事項 (a), (b) 参照) |
| 3 | LNA | I | 1 | 入 力 | 配列 AR, AI の整合寸法 |
| 4 | N | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の次数 |
| 5 | BR | {D / R} | N | 入 力 | 定数ベクトル$\boldsymbol{b}$の実部 |
| | | | | 出 力 | 解$\boldsymbol{x}$の実部 |
| 6 | BI | {D / R} | N | 入 力 | 定数ベクトル$\boldsymbol{b}$の虚部 |
| | | | | 出 力 | 解$\boldsymbol{x}$の虚部 |
| 7 | IERR | I | 1 | 出 力 | エラーインディケータ |

(4) **制限条件**

(a) $0 < \mathrm{N} \leq \mathrm{LNA}$

(5) **エラーインディケータ**

| IERR の値 | 意　味 | 処 理 内 容 |
|---|---|---|
| 0 | 正常終了. | |
| 1000 | N=1 であった. | B(1) ← B(1)/AR(1, 1) とする. |
| 3000 | 制限条件 (a) を満足しなかった. | 処理を打ち切る. |

(6) **注意事項**

(a) このサブルーチンを使用するには, 係数行列 $A$ を LDL* 分解しておく必要がある. 通常は 2.10.2 $\left\{\begin{matrix}\text{ZBHRUD}\\ \text{CBHRUD}\end{matrix}\right\}$ を使用して分解するが, 条件数も求めたい場合は 2.10.3 $\left\{\begin{matrix}\text{ZBHRUC}\\ \text{CBHRUC}\end{matrix}\right\}$ を使用する. また, 2.10.1 $\left\{\begin{matrix}\text{ZBHRSL}\\ \text{CBHRSL}\end{matrix}\right\}$ を使用して同一の係数行列 $A$ を持つ連立 1 次方程式をすでに解いている場合は, その出力として得られる LDL* 分解を利用することもできる. 定数ベクトル $b$ のみが異なる複数の連立 1 次方程式を解く場合には 2.10.5 $\left\{\begin{matrix}\text{ZBHRMS}\\ \text{CBHRMS}\end{matrix}\right\}$ を用いて計算する方が効率良く解が求まる.

(b) 配列 AR, AI には, 上三角行列 $L^*$ が格納されていなければならない. 対角行列 $D$ と下三角行列 $L$ は $L^*$ より算出されるので, 配列 AR, AI には格納されていなくてよい.
このサブルーチンは配列 AR, AI の上三角部分のみを使用する (2.10.1 図 2−10 参照).

### 2.10.5 ZBHRMS, CBHRMS 多重右辺連立 1 次方程式 (LDL* 分解後のエルミート行列) (軸選択なし)

(1) **機 能**

修正コレスキー法で LDL* 分解されたエルミート行列 $A$ (2 次元配列型) (上三角型) を係数行列とする連立 1 次方程式 $LDL^{*}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b_i} (i = 1, 2, \cdots, m)$ を解く.

(2) **使用法**

倍精度サブルーチン:

CALL ZBHRMS (AR, AI, LNA, N, BR, BI, LNB, M, IERR)

単精度サブルーチン:

CALL CBHRMS (AR, AI, LNA, N, BR, BI, LNB, M, IERR)

(3) **引 数**

D:倍精度実数型　Z:倍精度複素数型
R:単精度実数型　C:単精度複素数型
I: { 32 ビット整数版では INTEGER(4) / 64 ビット整数版では INTEGER(8) }

| 項番 | 引数名 | 型 | 大きさ | 入出力 | 内　容 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | AR | {D/R} | LNA, N | 入 力 | LDL* 分解後の係数行列 $A$ の実部 (エルミート行列, 2 次元配列型, 上三角型) (注意事項 (a), (b) 参照) |
| 2 | AI | {D/R} | LNA, N | 入 力 | LDL* 分解後の係数行列 $A$ の虚部 (エルミート行列, 2 次元配列型, 上三角型) (注意事項 (a), (b) 参照) |
| 3 | LNA | I | 1 | 入 力 | 配列 AR, AI の整合寸法 |
| 4 | N | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の次数 |
| 5 | BR | {D/R} | LNB, M | 入 力 | 定数ベクトル$\boldsymbol{b}$の実部 |
| | | | | 出 力 | 解$\boldsymbol{x}$の実部 |
| 6 | BI | {D/R} | LNB, M | 入 力 | 定数ベクトル$\boldsymbol{b}$の虚部 |
| | | | | 出 力 | 解$\boldsymbol{x}$の虚部 |
| 7 | LNB | I | 1 | 入 力 | 配列 BR, BI の整合寸法 |
| 8 | M | I | 1 | 入 力 | 右辺ベクトルの数 $m$ |
| 9 | IERR | I | 1 | 出 力 | エラーインディケータ |

(4) **制限条件**

(a) $0 < \mathrm{N} \leq \mathrm{LNA}, \mathrm{LNB}$

(b) $\mathrm{M} > 0$

(5) **エラーインディケータ**

| IERR の値 | 意　　　味 | 処　理　内　容 |
|---|---|---|
| 0 | 正常終了. | |
| 1000 | N=1 であった. | BR(1, i) ← BR(1, i)/AR(1, 1),<br>BI(1, i) ← BI(1, i)/AR(1, 1)<br>($i = 1, 2, \cdots, m$) とする. |
| 3000 | 制限条件 (a) を満足しなかった. | 処理を打ち切る. |
| 3010 | 制限条件 (b) を満足しなかった. | |

(6) **注意事項**

(a) このサブルーチンを使用するには, 係数行列 $A$ を LDL$^*$ 分解しておく必要がある. 通常は 2.10.2 $\left\{\begin{matrix}\text{ZBHRUD}\\\text{CBHRUD}\end{matrix}\right\}$ を使用して分解するが, 条件数も求めたい場合は 2.10.3 $\left\{\begin{matrix}\text{ZBHRUC}\\\text{CBHRUC}\end{matrix}\right\}$ を使用する. また, 2.10.1 $\left\{\begin{matrix}\text{ZBHRSL}\\\text{CBHRSL}\end{matrix}\right\}$ を使用して同一の係数行列 $A$ を持つ連立 1 次方程式をすでに解いている場合は, その出力として得られる LDL$^*$ 分解を利用することもできる.

(b) 配列 AR, AI には, 上三角行列 $L^*$ が格納されていなければならない. 対角行列 $D$ と下三角行列 $L$ は $L^*$ より算出されるので, 配列 AR, AI には格納されていなくてよい.
このサブルーチンは配列 AR, AI の上三角部分のみを使用する (2.10.1 図 2−10 参照).

(7) **使用例**

(a) 問 題

$$\begin{bmatrix} 9 & 7+3i & 2+5i & 1+1i \\ 7-3i & 10 & 3+2i & 2+4i \\ 2-5i & 3-2i & 8 & 5+1i \\ 1-1i & 2-4i & 5-1i & 6 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_{1,1} & x_{1,2} & x_{1,3} & x_{1,4} \\ x_{2,1} & x_{2,2} & x_{2,3} & x_{2,4} \\ x_{3,1} & x_{3,2} & x_{3,3} & x_{3,4} \\ x_{4,1} & x_{4,2} & x_{4,3} & x_{4,4} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 10+6i & 8+18i & 22i & 2+10i \\ 11+2i & 12+11i & 8+23i & 7+14i \\ 4+6i & 15+5i & 20+6i & 9+7i \\ 4+6i & 8+2i & 16+2i & 12+6i \end{bmatrix}$$

を解く. ただし, $i = \sqrt{-1}$.

(b) 入力データ

LDL$^*$ 後の係数行列の $A$, LNA = 11, N = 4, M, 定数ベクトル$\boldsymbol{b_i}$($i = 1, 2, \cdots$, M)

(c) 主プログラム

```
      PROGRAM ABHRMS
! *** EXAMPLE OF ZBHRUD, ZBHRMS ***
      IMPLICIT REAL(8) (A-H,O-Z)
      PARAMETER (LNA = 11)
      DIMENSION AR(LNA,LNA),AI(LNA,LNA),&
                BR(LNA,LNA),BI(LNA,LNA),WK(2*LNA)
!
      READ (5,*) N
      READ (5,*) M
      WRITE (6,1000) N, M
      DO 10 I = 1, N
         READ (5,*) (AR(I,J),AI(I,J),J=I,N)
   10 CONTINUE
      DO 15 I = 1, N
         WRITE(6,1100) (AR(J,I),-AI(J,I), J=1, I-1),&
                       (AR(I,J), AI(I,J), J=I, N)
   15 CONTINUE
      WRITE (6,1200)
      DO 20 J = 1, M
         READ (5,*) (BR(I,J),BI(I,J),I=1,N)
   20 CONTINUE
      DO 25 I = 1, N
         WRITE (6,1100) (BR(I,J),BI(I,J),J=1,M)
   25 CONTINUE
      WRITE (6,1300)
      CALL ZBHRUD (AR,AI,LNA,N,WK,IERR)
      WRITE (6,1400) 'ZBHRUD',IERR
```

```
      CALL ZBHRMS (AR,AI,LNA,N,BR,BI,LNA,M,JERR)
      WRITE (6,1400) 'ZBHRMS',JERR
      IF (IERR .GE. 3000) STOP
      WRITE (6,1600)
      DO 30 I = 1, N
         WRITE (6,1100) (BR(I,J),BI(I,J),J=1,M)
   30 CONTINUE
      STOP
!
 1000 FORMAT(1X,/,/,&
             1X ,'***  ZBHRUD, ZBHRMS  ***',/,/,&
             1X,1X,'**  INPUT  **',/,/,&
             1X,5X,'N =',I3,/,&
             1X,5X,'M =',I3,/,&
             /,1X,5X,'COEFFICIENT MATRIX')
 1100 FORMAT(1X,6X,4('(',F8.4,',',F8.4,')'))
 1200 FORMAT(/,1X,5X,'CONSTANT VECTORS')
 1300 FORMAT(/,1X,1X,'**  OUTPUT  **',/)
 1400 FORMAT(1X,5X,'ERR (',A6,') =',I5)
 1600 FORMAT(/,1X,5X,'SOLUTION')
      END
```

(d) 出力結果

```
***  ZBHRUD, ZBHRMS  ***

 **  INPUT  **

     N =  4
     M =  4

     COEFFICIENT MATRIX
      (  9.0000,  0.0000)(  7.0000,  3.0000)(  2.0000,  5.0000)(  1.0000,  1.0000)
      (  7.0000, -3.0000)( 10.0000,  0.0000)(  3.0000,  2.0000)(  2.0000,  4.0000)
      (  2.0000, -5.0000)(  3.0000, -2.0000)(  8.0000,  0.0000)(  5.0000,  1.0000)
      (  1.0000, -1.0000)(  2.0000, -4.0000)(  5.0000, -1.0000)(  6.0000,  0.0000)

     CONSTANT VECTORS
      ( 10.0000,  6.0000)(  8.0000, 18.0000)(  0.0000, 22.0000)(  2.0000, 10.0000)
      ( 11.0000,  2.0000)( 12.0000, 11.0000)(  8.0000, 23.0000)(  7.0000, 14.0000)
      (  4.0000,  6.0000)( 15.0000,  5.0000)( 20.0000,  6.0000)(  9.0000,  7.0000)
      (  4.0000,  6.0000)(  8.0000,  2.0000)( 16.0000,  2.0000)( 12.0000,  6.0000)

 **  OUTPUT  **

     ERR (ZBHRUD) =    0
     ERR (ZBHRMS) =    0

     SOLUTION
      (  1.0000,  0.0000)( -0.0000,  1.0000)(  0.0000,  1.0000)(  1.0000,  0.0000)
      (  1.0000,  0.0000)(  1.0000, -0.0000)( -0.0000,  1.0000)(  0.0000,  1.0000)
      ( -0.0000,  1.0000)(  1.0000, -0.0000)(  1.0000,  0.0000)( -0.0000,  1.0000)
      ( -0.0000,  1.0000)(  0.0000,  1.0000)(  1.0000, -0.0000)(  1.0000, -0.0000)
```

## 2.10.6 ZBHRDI, CBHRDI エルミート行列の行列式と逆行列 (軸選択なし)

(1) **機 能**

修正コレスキー法で $LDL^*$ 分解されたエルミート行列 $A$ (2 次元配列型) (上三角型) の行列式と逆行列を求める.

(2) **使用法**

倍精度サブルーチン:

CALL ZBHRDI (AR, AI, LNA, N, DET, ISW, W1, IERR)

単精度サブルーチン:

CALL CBHRDI (AR, AI, LNA, N, DET, ISW, W1, IERR)

(3) **引 数**

D:倍精度実数型　Z:倍精度複素数型　I: {32 ビット整数版では INTEGER(4) / 64 ビット整数版では INTEGER(8)}
R:単精度実数型　C:単精度複素数型

| 項番 | 引数名 | 型 | 大きさ | 入出力 | 内　容 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | AR | {D/R} | LNA, N | 入 力 | $LDL^*$ 分解後のエルミート行列 $A$ の実部 (2 次元配列型)(上三角型) (注意事項 (a), (b) 参照) |
| | | | | 出 力 | 行列 $A$ の逆行列の実部 (注意事項 (b) 参照) |
| 2 | AI | {D/R} | LNA, N | 入 力 | $LDL^*$ 分解後のエルミート行列 $A$ の虚部 (2 次元配列型)(上三角型) (注意事項 (a), (b) 参照) |
| | | | | 出 力 | 行列 $A$ の逆行列の虚部 (注意事項 (b) 参照) |
| 3 | LNA | I | 1 | 入 力 | 配列 AR, AI の整合寸法 |
| 4 | N | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の次数 |
| 5 | DET | {D/R} | 2 | 出 力 | 行列 $A$ の行列式の値 (注意事項 (c) 参照) |
| 6 | ISW | I | 1 | 入 力 | 処理スイッチ<br>ISW>0:行列式の値を求める.<br>ISW=0:行列式の値と逆行列を求める.<br>ISW<0:逆行列を求める. |
| 7 | W1 | {D/R} | N | ワーク | 作業領域 |
| 8 | IERR | I | 1 | 出 力 | エラーインディケータ |

(4) **制限条件**

(a) $0 < \mathrm{N} \leq \mathrm{LNA}$

(5) **エラーインディケータ**

| IERR の値 | 意　　味 | 処　理　内　容 |
|---|---|---|
| 0 | 正常終了. | |
| 1000 | N = 1 であった. | DET(1) ← A(1, 1)<br>DET(2) ← 0.0<br>AR(1, 1) ← 1.0/AR(1, 1) とする. |
| 3000 | 制限条件 (a) を満足しなかった. | 処理を打ち切る. |

(6) **注意事項**

(a) このサブルーチンを使用するには, 係数行列 $A$ を LDL$^*$ 分解しておく必要がある.
分解は, 2.10.2 $\left\{\begin{matrix}\text{ZBHRUD}\\ \text{CBHRUD}\end{matrix}\right\}$, 2.10.3 $\left\{\begin{matrix}\text{ZBHRUC}\\ \text{CBHRUC}\end{matrix}\right\}$, 2.10.1 $\left\{\begin{matrix}\text{ZBHRSL}\\ \text{CBHRSL}\end{matrix}\right\}$のいずれかで行えばよい.

(b) 配列 AR, AI には, 上三角行列 $L^*$ が格納されていなければならない. 対角行列 $D$, および下三角行列 $L$ は $L^*$ より算出されるので, 配列 AR, AI には格納されなくてよい. 逆行列 $A^{-1}$ はやはりエルミート行列であるので, 上三角部分のみが $A$ に格納される.
このサブルーチンは配列 AR, AI の上三角部分のみを使用する (2.10.1 図 2−10 参照).

(c) 行列式の値は次の式で与えられる.
$det(A) = \mathrm{DET}(1) \times 10^{\mathrm{DET}(2)}$
このとき, $1.0 \leq |\mathrm{DET}(1)| < 10.0$ となるようにスケーリングされている.

(d) **行列の次数が 100 以下など十分に小さい場合や, 逆行列そのものが必要である場合を除いて, 逆行列を計算すべきではない.** 数値計算では多くの場合, 逆行列は, $A^{-1}\boldsymbol{b}$ や $A^{-1}B$ といった形式で現れるが, これらはそれぞれ, ベクトル $\boldsymbol{x}$ についての連立 1 次方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$, 行列 $X$ についての多重右辺連立 1 次方程式 $AX = B$ として連立 1 次方程式を解いて計算すべきである. 数学的には, 逆行列を求めて逆行列とベクトルの積や逆行列と行列の積を計算することと前述のような連立 1 次方程式を解くことは同じであるが, 数値計算上は一般に, 逆行列による求解は計算効率も悪く, 計算精度も劣る.

## 2.10.7 ZBHRLX, CBHRLX 連立 1 次方程式の解の改良 (エルミート行列) (軸選択なし)

(1) **機 能**

エルミート行列 $A$ (2 次元配列型) (上三角型) を係数行列とする連立 1 次方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ の解を反復法により改良する.

(2) **使用法**

倍精度サブルーチン:

CALL ZBHRLX (AR, AI, LNA, N, ALR, ALI, BR, BI, XR, XI, ITOL, NIT, W1, IERR)

単精度サブルーチン:

CALL CBHRLX (AR, AI, LNA, N, ALR, ALI, BR, BI, XR, XI, ITOL, NIT, W1, IERR)

(3) **引 数**

D:倍精度実数型　Z:倍精度複素数型
R:単精度実数型　C:単精度複素数型
I: {32 ビット整数版では INTEGER(4) / 64 ビット整数版では INTEGER(8)}

| 項番 | 引数名 | 型 | 大きさ | 入出力 | 内　容 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | AR | {D/R} | LNA, N | 入 力 | 係数行列 $A$ の実部 (エルミート行列, 2 次元配列型, 上三角型) |
| 2 | AI | {D/R} | LNA, N | 入 力 | 係数行列 $A$ の虚部 (エルミート行列, 2 次元配列型, 上三角型) |
| 3 | LNA | I | 1 | 入 力 | 配列 AR, AI, ALR, ALI の整合寸法 |
| 4 | N | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の次数 |
| 5 | ALR | {D/R} | LNA, N | 入 力 | $LDL^*$ 分解後の係数行列 $A$ の実部 (注意事項 (a) 参照) |
| 6 | ALI | {D/R} | LNA, N | 入 力 | $LDL^*$ 分解後の係数行列 $A$ の虚部 (注意事項 (a) 参照) |
| 7 | BR | {D/R} | N | 入 力 | 定数ベクトル$\boldsymbol{b}$の実部 |
| 8 | BI | {D/R} | N | 入 力 | 定数ベクトル$\boldsymbol{b}$の虚部 |
| 9 | XR | {D/R} | N | 入 力 | 近似解 $\boldsymbol{x}$ の実部 |
| | | | | 出 力 | 反復改良された解 $\boldsymbol{x}$ の実部 |
| 10 | XI | {D/R} | N | 入 力 | 近似解 $\boldsymbol{x}$ の虚部 |
| | | | | 出 力 | 反復改良された解 $\boldsymbol{x}$ の虚部 |
| 11 | ITOL | I | 1 | 入 力 | 反復改良したい桁数 (注意事項 (b) 参照) |
| | | | | 出 力 | 反復改良された桁数の近似値 (注意事項 (c) 参照) |
| 12 | NIT | I | 1 | 入 力 | 最大反復回数 (注意事項 (d) 参照) |
| 13 | W1 | {D/R} | 3 × N | ワーク | 作業領域 |
| 14 | IERR | I | 1 | 出 力 | エラーインディケータ |

### (4) 制限条件

(a) $0 < \mathrm{N} \leq \mathrm{LNA}$

### (5) エラーインディケータ

| IERR の値 | 意　　　味 | 処　理　内　容 |
|---|---|---|
| 0 | 正常終了. | |
| 1000 | N=1 であった. | 解は改良されない. |
| 3000 | 制限条件 (a) を満足しなかった. | 処理を打ち切る. |
| 5000 | 最大反復回数以内で収束しなかった. | ITOL の出力値を計算し, 処理を打ち切る. |
| 6000 | 解を改良できなかった. | |

### (6) 注意事項

(a) このサブルーチンは, 2.10.1 $\left\{\begin{array}{c}\mathrm{ZBHRSL}\\ \mathrm{CBHRSL}\end{array}\right\}$ または 2.10.4 $\left\{\begin{array}{c}\mathrm{ZBHRLS}\\ \mathrm{CBHRLS}\end{array}\right\}$ によって得られた解を, さらに改良するものである. 従って, 入力として 2.10.1 $\left\{\begin{array}{c}\mathrm{ZBHRSL}\\ \mathrm{CBHRSL}\end{array}\right\}$, 2.10.2 $\left\{\begin{array}{c}\mathrm{ZBHRUD}\\ \mathrm{CBHRUD}\end{array}\right\}$ または 2.10.3 $\left\{\begin{array}{c}\mathrm{ZBHRUC}\\ \mathrm{CBHRUC}\end{array}\right\}$ によって分解された係数行列 $A$ を与えなければならない.

(b) 解の改良は, 解の上位 ITOL 桁が修正されなくなるまで反復される. ただし, 以下の条件を満たす場合は, 解の修正が下位 1 ビット以下になるまで反復される.
ITOL $\leq 0$ または ITOL $\geq -$ LOG10 $(2 \times \varepsilon)$ ($\varepsilon$ : 誤差判定のための単位)

(c) 反復回数以内で, 要求された桁数が収束しなかった場合, 修正されなくなった桁数の近似値が ITOL に返される.

(d) NIT の入力値が 0 以下の場合, 既定値として 40 がとられる.

## 2.11 エルミート行列 (2 次元配列型) (上三角型) (複素引数型)

### 2.11.1 ZBHFSL, CBHFSL
### 連立 1 次方程式 (エルミート行列)

(1) **機 能**

エルミート行列 $A$ (2 次元配列型) (上三角型) を係数行列とする連立 1 次方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ を修正コレスキー法を用いて解く.

(2) **使用法**

倍精度サブルーチン:

CALL ZBHFSL (A, LNA, N, B, IPVT, W1, IERR)

単精度サブルーチン:

CALL CBHFSL (A, LNA, N, B, IPVT, W1, IERR)

(3) **引 数**

D:倍精度実数型　Z:倍精度複素数型
R:単精度実数型　C:単精度複素数型

I: {32 ビット整数版では INTEGER(4)<br>64 ビット整数版では INTEGER(8)}

| 項番 | 引数名 | 型 | 大きさ | 入出力 | 内　　容 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | A | {Z, C} | LNA, N | 入 力 | 係数行列 $A$(エルミート行列, 2 次元配列型, 上三角型) |
| | | | | 出 力 | $A = LDL^*$ と分解したときの, 上三角行列 $L^*$ (注意事項 (b) 参照) |
| 2 | LNA | I | 1 | 入 力 | 配列 A の整合寸法 |
| 3 | N | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の次数 |
| 4 | B | {Z, C} | N | 入 力 | 定数ベクトル$\boldsymbol{b}$ |
| | | | | 出 力 | 解$\boldsymbol{x}$ |
| 5 | IPVT | I | N | 出 力 | ピボッティング情報 IPVT(i) :<br>i 段目の処理において行 (列)i と交換した行 (列) の番号 (注意事項 (c) 参照) |
| 6 | W1 | {D, R} | N | ワーク | 作業領域 |
| 7 | IERR | I | 1 | 出 力 | エラーインディケータ |

(4) **制限条件**

(a) $0 < \mathrm{N} \leq \mathrm{LNA}$

(5) **エラーインディケータ**

| IERR の値 | 意　　　味 | 処　理　内　容 |
|---|---|---|
| 0 | 正常終了. | |
| 1000 | N=1 であった. | 配列 A の内容は変更されない.<br>B(1) ← B(1)/A(1, 1) とする. |
| 2100 | 係数行列 A の LDL* 分解の処理において, 対角要素が 0 に近いものがあった. 分解行列を使って求解もしくは逆行列を計算する場合, 精度の良い結果が得られない場合がある. | 処理を続ける. |
| 3000 | 制限条件 (a) を満足しなかった. | 処理を打ち切る. |
| $4000+i$ | 係数行列 $A$ の LDL* 分解の $i$ 段目の処理において, 対角要素が 0.0 となった.<br>$A$ は特異である. | |

(6) **注意事項**

(a) 定数ベクトル$\boldsymbol{b}$のみが異なる複数の連立 1 次方程式を解く場合には, このサブルーチンを一度使用した後, 続けて 2.11.4 $\left\{\begin{matrix}\text{ZBHFLS}\\ \text{CBHFLS}\end{matrix}\right\}$を配列 B の内容のみを変えて使用すればよい. このようにすれば行列 $A$ の LDL* 分解が一度だけしか行われないため, 効率よく解が求まる.

(b) 配列 A の上三角部分に上三角行列 $L^*$ が格納される. 対角行列 $D$, および下三角行列 $L$ は $L^*$ より算出されるので, 配列 A には格納されない. 行列 $L$ は行列 $L^*$ の随伴行列であり, 行列 $D$ は行列 $L^*$ の対角要素の逆数を成分とする対角行列である.

(c) このサブルーチンでは, 係数行列 $A$ の LDL* 分解時に, 部分軸選択 (partial pivoting) が行われている. 部分軸選択は行と列について対称に行われる. 第 i 段目のピボット行 (列) が第 j 行 (列)(i ≤ j) となった場合, IPVT(i) に j が格納される. また, このとき, 行列 $A$ の第 i 行 (列) と第 j 行 (列) の対応する列 (行) 要素のうち, 第 i 列 (行) から第 n 列 (行) までの要素が実際に交換される.

図 2−11　行列 $L^*$ の格納状態と行列 $D$ の内容

$$
\text{行列 } L^* \quad
\begin{bmatrix}
l_{1,1} & l_{2,1} & l_{3,1} & \cdots & l_{5,1} \\
0.0 & l_{2,2} & l_{3,2} & \cdots & l_{5,2} \\
0.0 & 0.0 & l_{3,3} & \cdots & l_{5,3} \\
\vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
0.0 & 0.0 & 0.0 & \cdots & l_{5,5}
\end{bmatrix}
\qquad
\text{行列 } D \quad
\begin{bmatrix}
1/l_{1,1} & 0.0 & 0.0 & \cdots & 0.0 \\
0.0 & 1/l_{2,2} & 0.0 & \cdots & 0.0 \\
0.0 & 0.0 & 1/l_{3,3} & \cdots & 0.0 \\
\vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
0.0 & 0.0 & 0.0 & \cdots & 1/l_{5,5}
\end{bmatrix}
$$

$$\Downarrow$$

配列A(LNA, K)の格納状態

$$
\text{LNA} \quad
\begin{array}{ccccc}
l_{1,1} & l_{2,1} & l_{3,1} & \cdots & l_{5,1} \\
* & l_{2,2} & l_{3,2} & \cdots & l_{5,2} \\
* & * & l_{3,3} & \cdots & l_{5,3} \\
\vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
* & * & * & \cdots & l_{5,5}
\end{array}
\quad \text{N}
$$

$\longleftarrow$ − − − − − −N− − − − − − $\longrightarrow$

$\longleftarrow$ − − − − − − − −K− − − − − − − − $\longrightarrow$

**備　考**

a.　LNA ≥ N, N ≤ K を満たさなければならない.

b.　∗ に対応する入力時の値は保証されない.

(7) **使用例**

(a) 問 題

$$
\begin{bmatrix}
9 & 7+3i & 2+5i & 1+i \\
7-3i & 10 & 3+2i & 2+4i \\
2-5i & 3-2i & 8 & 5+i \\
1-i & 2-4i & 5-i & 6
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix}
=
\begin{bmatrix} 10+6i \\ 11+2i \\ 4+6i \\ 4+6i \end{bmatrix}
$$

を解く.

(b) 入力データ

係数行列 $A$, LNA = 11, N = 4, 定数ベクトル$\boldsymbol{b}$

(c) 主プログラム

```
      PROGRAM ABHFSL
!     *** EXAMPLE OF ZBHFSL ***
      IMPLICIT REAL(8) (A-H,O-Z)
      PARAMETER (LNA = 11,LNW = 22)
      COMPLEX(8) A(LNA,LNA),B(LNA),W1(LNW)
      INTEGER IPVT(LNA)
!
      READ (5,*) N
      WRITE (6,1000) N
      DO 10 I = 1, N
        READ (5,*) (A(I,J),J=I,N)
   10 CONTINUE
        WRITE (6,2000) (A(1,J),J=1,N)
        WRITE (6,2100) (A(2,J),J=2,N)
        WRITE (6,2200) (A(3,J),J=3,N)
        WRITE (6,2300) (A(4,J),J=4,N)
      READ (5,*) (B(I),I=1,N)
      WRITE (6,1100)
      DO 20 I = 1, N
      WRITE (6,1200) B(I)
   20 CONTINUE
      WRITE (6,1300)
      CALL ZBHFSL (A,LNA,N,B,IPVT,W1,IERR)
      WRITE (6,1400) 'ZBHFSL',IERR
      WRITE (6,1600)
      DO 30 I = 1, N
      WRITE (6,1700) I,B(I)
   30 CONTINUE
      STOP
!
 1000 FORMAT (' ',/,/,' ***  ZBHFSL  ***',/,2X,'**  INPUT  **',&
             /,6X,'N =',I3,&
             /,6X,'COEFFICIENT MATRIX ( REAL, IMAGINARY )')
 1100 FORMAT (6X,'CONSTANT VECTOR ( REAL, IMAGINARY )')
 1200 FORMAT (6X,' (',F5.1,' ,',F5.1,' )')
 1300 FORMAT (2X,'**  OUTPUT  **')
 1400 FORMAT (6X,'IERR (',A6,') =',I5)
 1600 FORMAT (6X,'SOLUTION ( REAL, IMAGINARY )')
 1700 FORMAT (10X,'X(',I2,') = (',D18.10,' ,',D18.10,' )')
 2000 FORMAT (6X,       4(1X,'(',F5.1,' ,',F5.1,1X,')'))
```

```
  2100 FORMAT (6X,  16X, 3(1X,'(',F5.1,' ,',F5.1,1X,')'))
  2200 FORMAT (6X,2(16X),2(1X,'(',F5.1,' ,',F5.1,1X,')'))
  2300 FORMAT (6X,3(16X),  1X,'(',F5.1,' ,',F5.1,1X,')' )
       END
```

(d) 出力結果

```
 ***  ZBHFSL  ***
  **  INPUT  **
      N =  4
      COEFFICIENT MATRIX ( REAL, IMAGINARY )
       (  9.0 ,  0.0 ) (  7.0 ,  3.0 ) (  2.0 ,  5.0 ) (  1.0 ,  1.0 )
                       ( 10.0 ,  0.0 ) (  3.0 ,  2.0 ) (  2.0 ,  4.0 )
                                       (  8.0 ,  0.0 ) (  5.0 ,  1.0 )
                                                       (  6.0 ,  0.0 )
      CONSTANT VECTOR ( REAL, IMAGINARY )
       ( 10.0 ,  6.0 )
       ( 11.0 ,  2.0 )
       (  4.0 ,  6.0 )
       (  4.0 ,  6.0 )
  **  OUTPUT  **
      IERR (ZBHFSL) =    0
      SOLUTION ( REAL, IMAGINARY )
          X( 1) = (  0.1000000000D+01 ,  0.0000000000D+00 )
          X( 2) = (  0.1000000000D+01 ,  0.8881784197D-16 )
          X( 3) = ( -0.4971147871D-16 ,  0.1000000000D+01 )
          X( 4) = ( -0.4170837849D-16 ,  0.1000000000D+01 )
```

### 2.11.2 ZBHFUD, CBHFUD<br>エルミート行列の LDL* 分解

(1) **機 能**

エルミート行列 $A$ (2 次元配列型) (上三角型) を修正コレスキー法を用いて LDL* 分解する.

(2) **使用法**

倍精度サブルーチン:

CALL ZBHFUD (A, LNA, N, IPVT, W1, IERR)

単精度サブルーチン:

CALL CBHFUD (A, LNA, N, IPVT, W1, IERR)

(3) **引 数**

D:倍精度実数型　Z:倍精度複素数型
R:単精度実数型　C:単精度複素数型
I: {32 ビット整数版では INTEGER(4) / 64 ビット整数版では INTEGER(8)}

| 項番 | 引数名 | 型 | 大きさ | 入出力 | 内　容 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | A | {Z / C} | LNA, N | 入 力 | エルミート行列 $A$(2 次元配列型)(上三角型) |
| | | | | 出 力 | $A = LDL^*$ と分解したときの, 上三角行列 $L^*$ (注意事項 (a) 参照) |
| 2 | LNA | I | 1 | 入 力 | 配列 A の整合寸法 |
| 3 | N | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の次数 |
| 4 | IPVT | I | N | 出 力 | ピボッティング情報 IPVT(i) :<br>i 段目の処理において行 (列)i と交換した行 (列) の番号 (注意事項 (b) 参照) |
| 5 | W1 | {D / R} | N | ワーク | 作業領域 |
| 6 | IERR | I | 1 | 出 力 | エラーインディケータ |

(4) **制限条件**

(a) $0 < \mathrm{N} \leq \mathrm{LNA}$

(5) **エラーインディケータ**

| IERR の値 | 意　　　　味 | 処　理　内　容 |
|---|---|---|
| 0 | 正常終了. | |
| 1000 | N=1 であった. | 配列 A の内容は変更されない. |
| 2100 | 係数行列 A の LDL* 分解の処理において, 対角要素が 0 に近いものがあった. 分解行列を使って求解もしくは逆行列を計算する場合, 精度の良い結果が得られない場合がある. | 処理を続ける. |
| 3000 | 制限条件 (a) を満足しなかった. | 処理を打ち切る. |
| $4000 + i$ | $i$ 段目の処理において, 対角要素が 0.0 となった.<br>$A$ は特異である. | |

(6) **注意事項**

(a) 配列 A には, 上三角部分に上三角行列 $L^*$ が格納される. 対角行列 $D$, および下三角行列 $L$ は $L^*$ より算出されるので, 配列 A には格納されない. このサブルーチンは配列 A の上三角部分のみを使用する (2.11.1 図 2−11 参照).

(b) このサブルーチンでは, 係数行列 $A$ の LDL* 分解時に, 部分軸選択 (partial pivoting) が行われている. 部分軸選択は行と列について対称に行われる. 第 i 段目のピボット行 (列) が第 j 行 (列)(i ≤ j) となった場合, IPVT(i) に j が格納される. また, このとき, 行列 $A$ の第 i 行 (列) と第 j 行 (列) の対応する列 (行) 要素のうち, 第 i 列 (行) から第 n 列 (行) までの要素が実際に交換される.

### 2.11.3 ZBHFUC, CBHFUC
### エルミート行列の LDL* 分解と条件数

(1) **機 能**

エルミート行列 $A$ (2 次元配列型) (上三角型) を修正コレスキー法を用いて LDL* 分解し, 条件数を求める.

(2) **使用法**

倍精度サブルーチン:

CALL ZBHFUC (A, LNA, N, IPVT, COND, W1, IERR)

単精度サブルーチン:

CALL CBHFUC (A, LNA, N, IPVT, COND, W1, IERR)

(3) **引 数**

D:倍精度実数型　Z:倍精度複素数型　I: { 32 ビット整数版では INTEGER(4) / 64 ビット整数版では INTEGER(8) }
R:単精度実数型　C:単精度複素数型

| 項番 | 引数名 | 型 | 大きさ | 入出力 | 内容 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | A | {Z / C} | LNA, N | 入 力 | エルミート行列 $A$(2 次元配列型)(上三角型) |
| | | | | 出 力 | $A = LDL^*$ と分解したときの, 上三角行列 $L^*$ (注意事項 (a) 参照) |
| 2 | LNA | I | 1 | 入 力 | 配列 A の整合寸法 |
| 3 | N | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の次数 |
| 4 | IPVT | I | N | 出 力 | ピボッティング情報 IPVT(i) :<br>i 段目の処理において行 (列)i と交換した行 (列) の番号 (注意事項 (b) 参照) |
| 5 | COND | {D / R} | 1 | 出 力 | 条件数の逆数 |
| 6 | W1 | {Z / C} | N | ワーク | 作業領域 |
| 7 | IERR | I | 1 | 出 力 | エラーインディケータ |

(4) **制限条件**

(a) $0 < \mathrm{N} \leq \mathrm{LNA}$

(5) **エラーインディケータ**

| IERR の値 | 意　　　　　　味 | 処　理　内　容 |
|---|---|---|
| 0 | 正常終了. | |
| 1000 | N=1 であった. | 配列 A の内容は変更されない.<br>COND ← 1.0 とする. |
| 2100 | 係数行列 A の LDL* 分解の処理において, 対角要素が 0 に近いものがあった. 分解行列を使って求解もしくは逆行列を計算する場合, 精度の良い結果が得られない場合がある. | 処理を続ける. |
| 3000 | 制限条件 (a) を満足しなかった. | 処理を打ち切る. |
| $4000+i$ | $i$ 段目の処理において, 対角要素が 0.0 となった.<br>$A$ は特異である. | 処理を打ち切る.<br>条件数は求められない. |

(6) **注意事項**

(a) 配列 A には, 上三角部分に上三角行列 $L^*$ が格納される. 対角行列 $D$, および下三角行列 $L$ は $L^*$ より算出されるので, 配列 A には格納されない (2.11.1 図 2−11 参照).

(b) このサブルーチンでは, 係数行列 $A$ の LDL* 分解時に, 部分軸選択 (partial pivoting) が行われている. 部分軸選択は行と列について対称に行われる. 第 i 段目のピボット行 (列) が第 j 行 (列)(i ≤ j) となった場合, IPVT(i) に j が格納される. また, このとき, 行列 $A$ の第 i 行 (列) と第 j 行 (列) の対応する列 (行) 要素のうち, 第 i 列 (行) から第 n 列 (行) までの要素が実際に交換される.

(c) 条件数は $\|A\| \cdot \|A^{-1}\|$ で定義されるが, このサブルーチンで求められるのはその概算値である.

## 2.11.4 ZBHFLS, CBHFLS
## 連立 1 次方程式 (LDL* 分解後のエルミート行列)

(1) **機 能**

修正コレスキー法で LDL* 分解されたエルミート行列 $A$ (2 次元配列型) (上三角型) を係数行列とする連立 1 次方程式 $LDL^*\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ を解く.

(2) **使用法**

倍精度サブルーチン:
CALL ZBHFLS (A, LNA, N, B, IPVT, IERR)
単精度サブルーチン:
CALL CBHFLS (A, LNA, N, B, IPVT, IERR)

(3) **引 数**

D:倍精度実数型　Z:倍精度複素数型
R:単精度実数型　C:単精度複素数型
I: { 32 ビット整数版では INTEGER(4) / 64 ビット整数版では INTEGER(8) }

| 項番 | 引数名 | 型 | 大きさ | 入出力 | 内　容 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | A | {Z / C} | LNA, N | 入 力 | LDL* 分解後の係数行列 $A$ (エルミート行列, 2 次元配列型, 上三角型)(注意事項 (a), (b) 参照) |
| 2 | LNA | I | 1 | 入 力 | 配列 A の整合寸法 |
| 3 | N | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の次数 |
| 4 | B | {Z / C} | N | 入 力 | 定数ベクトル$\boldsymbol{b}$ |
| | | | | 出 力 | 解$\boldsymbol{x}$ |
| 5 | IPVT | I | N | 入 力 | ピボッティング情報 IPVT(i) : i 段目の処理において行 (列)i と交換した行 (列) の番号 (注意事項 (c) 参照) |
| 6 | IERR | I | 1 | 出 力 | エラーインディケータ |

(4) **制限条件**

(a) $0 < \mathrm{N} \leq \mathrm{LNA}$

(5) **エラーインディケータ**

| IERR の値 | 意　味 | 処 理 内 容 |
|---|---|---|
| 0 | 正常終了. | |
| 1000 | N = 1 であった. | $\mathrm{B}(1) \leftarrow \mathrm{B}(1)/\mathrm{A}(1,1)$ とする. |
| 3000 | 制限条件 (a) を満足しなかった. | 処理を打ち切る. |

(6) **注意事項**

(a) このサブルーチンを使用するには, 係数行列 $A$ を LDL* 分解しておく必要がある. 通常は 2.11.2 $\left\{\begin{matrix}\text{ZBHFUD}\\\text{CBHFUD}\end{matrix}\right\}$ を使用して分解するが, 条件数も求めたい場合は 2.11.3 $\left\{\begin{matrix}\text{ZBHFUC}\\\text{CBHFUC}\end{matrix}\right\}$ を使用する. また, 2.11.1 $\left\{\begin{matrix}\text{ZBHFSL}\\\text{CBHFSL}\end{matrix}\right\}$ を使用して同一の係数行列 $A$ を持つ連立 1 次方程式をすでに解いている場合は, その出力として得られる LDL* 分解を利用することもできる. 定数ベクトル $b$ のみが異なる複数の連立 1 次方程式を解く場合には 2.11.5 $\left\{\begin{matrix}\text{ZBHFMS}\\\text{CBHFMS}\end{matrix}\right\}$ を用いて計算する方が効率良く解が求まる.

(b) 配列 A には, 上三角行列 $L^*$ が格納されていなければならない. 対角行列 $D$ と下三角行列 $L$ は $L^*$ より算出されるので, 配列 A には格納されていなくてよい (2.11.1 図 2−11 参照).

(c) IPVT には, LDL* 分解時に行った部分軸選択 (partial pivoting) についての情報が格納されていなければならない. この情報は行列 $A$ の $LDL^*$ 分解を行う 2.11.2 $\left\{\begin{matrix}\text{ZBHFUD}\\\text{CBHFUD}\end{matrix}\right\}$, 2.11.3 $\left\{\begin{matrix}\text{ZBHFUC}\\\text{CBHFUC}\end{matrix}\right\}$, 2.11.1 $\left\{\begin{matrix}\text{ZBHFSL}\\\text{CBHFSL}\end{matrix}\right\}$ によって与えられる.

## 2.11.5 ZBHFMS, CBHFMS 多重右辺連立 1 次方程式 (LDL* 分解後のエルミート行列)

(1) **機 能**

修正コレスキー法で LDL* 分解されたエルミート行列 $A$ (2 次元配列型) (上三角型) を係数行列とする連立 1 次方程式 $LDL^{*}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b_i} (i = 1, 2, \cdots, m)$ を解く.

(2) **使用法**

倍精度サブルーチン:

CALL ZBHFMS (A, LNA, N, B, LNB, M, IPVT, IERR)

単精度サブルーチン:

CALL CBHFMS (A, LNA, N, B, LNB, M, IPVT, IERR)

(3) **引 数**

D:倍精度実数型　Z:倍精度複素数型
R:単精度実数型　C:単精度複素数型
I: {32 ビット整数版では INTEGER(4)　64 ビット整数版では INTEGER(8)}

| 項番 | 引数名 | 型 | 大きさ | 入出力 | 内　容 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | A | {Z C} | LNA, N | 入 力 | LDL* 分解後の係数行列 $A$ (エルミート行列, 2 次元配列型, 上三角型) (注意事項 (a), (b) 参照) |
| 2 | LNA | I | 1 | 入 力 | 配列 AR, AI の整合寸法 |
| 3 | N | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の次数 |
| 4 | B | {Z C} | LNB, M | 入 力 | 定数ベクトル $\boldsymbol{b_i} (i = 1, 2, \cdots, m)$ |
| | | | | 出 力 | 解 $\boldsymbol{x_i} (i = 1, 2, \cdots, m)$ |
| 5 | LNB | I | 1 | 入 力 | 配列 BR, BI の整合寸法 |
| 6 | M | I | 1 | 入 力 | 右辺ベクトルの数 $m$ |
| 7 | IPVT | I | N | 入 力 | ピボッティング情報 IPVT(i) : i 段目の処理において行 (列)i と交換した行 (列) の番号 (注意事項 (c) 参照) |
| 8 | IERR | I | 1 | 出 力 | エラーインディケータ |

(4) **制限条件**

(a) $0 < \mathrm{N} \leq \mathrm{LNA}, \mathrm{LNB}$

(b) $\mathrm{M} > 0$

(5) **エラーインディケータ**

| IERR の値 | 意　　味 | 処　理　内　容 |
|---|---|---|
| 0 | 正常終了. | |
| 1000 | N=1 であった. | B(1, i) ← B(1, i)/A(1, 1) ($i = 1, 2, \cdots, m$) とする. |
| 3000 | 制限条件 (a) を満足しなかった. | 処理を打ち切る. |
| 3010 | 制限条件 (b) を満足しなかった. | |

(6) **注意事項**

(a) このサブルーチンを使用するには, 係数行列 $A$ を LDL* 分解しておく必要がある. 通常は 2.11.2 $\left\{\begin{matrix}\text{ZBHFUD}\\\text{CBHFUD}\end{matrix}\right\}$ を使用して分解するが, 条件数も求めたい場合は 2.11.3 $\left\{\begin{matrix}\text{ZBHFUC}\\\text{CBHFUC}\end{matrix}\right\}$ を使用する. また, 2.11.1 $\left\{\begin{matrix}\text{ZBHFSL}\\\text{CBHFSL}\end{matrix}\right\}$ を使用して同一の係数行列 $A$ を持つ連立 1 次方程式をすでに解いている場合は, その出力として得られる LDL* 分解を利用することもできる.

(b) 配列 A には, 上三角行列 $L^*$ が格納されていなければならない. 対角行列 $D$ と下三角行列 $L$ は $L^*$ より算出されるので, 配列 A には格納されていなくてよい.
このサブルーチンは配列 A の上三角部分のみを使用する (2.11.1 図 2−11 参照).

(c) IPVT には, LDL* 分解時に行った部分軸選択 (partial pivoting) についての情報が格納されていなければならない. この情報は行列 $A$ の LDL* 分解を行うサブルーチン 2.11.2 $\left\{\begin{matrix}\text{ZBHFUD}\\\text{CBHFUD}\end{matrix}\right\}$,2.11.3 $\left\{\begin{matrix}\text{ZBHFUC}\\\text{CBHFUC}\end{matrix}\right\}$,2.11.1 $\left\{\begin{matrix}\text{ZBHFSL}\\\text{CBHFSL}\end{matrix}\right\}$ によって与えられる.

(7) **使用例**

(a) 問 題

$$\begin{bmatrix} 9 & 7+3i & 2+5i & 1+1i \\ 7-3i & 10 & 3+2i & 2+4i \\ 2-5i & 3-2i & 8 & 5+1i \\ 1-1i & 2-4i & 5-1i & 6 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_{1,1} & x_{1,2} & x_{1,3} & x_{1,4} \\ x_{2,1} & x_{2,2} & x_{2,3} & x_{2,4} \\ x_{3,1} & x_{3,2} & x_{3,3} & x_{3,4} \\ x_{4,1} & x_{4,2} & x_{4,3} & x_{4,4} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 10+6i & 8+18i & 22i & 2+10i \\ 11+2i & 12+11i & 8+23i & 7+14i \\ 4+6i & 15+5i & 20+6i & 9+7i \\ 4+6i & 8+2i & 16+2i & 12+6i \end{bmatrix}$$

を解く. ただし, $i = \sqrt{-1}$.

(b) 入力データ
LDL* 後の係数行列の $A$, LNA $= 11$, N $= 4$, M, 定数ベクトル $\boldsymbol{b_i}$($i = 1, 2, \cdots,$ M)

(c) 主プログラム

```
      PROGRAM ABHFMS
! *** EXAMPLE OF ZBHFUD, ZBHFMS ***
      IMPLICIT REAL(8) (A-H,O-Z)
      PARAMETER (LNA = 11)
      COMPLEX(8) A, B
      DIMENSION A(LNA,LNA),B(LNA,LNA),IPVT(LNA),WK(LNA)
!
      READ (5,*) N
      READ (5,*) M
      WRITE (6,1000) N, M
      DO 10 I = 1, N
         READ (5,*) (A(I,J),J=I,N)
   10 CONTINUE
      DO 15 I = 1, N
         WRITE(6,1100) (DCONJG(A(J,I)), J=1, I-1), (A(I,J), J=I, N)
   15 CONTINUE
      WRITE (6,1200)
      DO 20 J = 1, M
```

```
         READ (5,*) (B(I,J),I=1,N)
   20 CONTINUE
      DO 25 I = 1, N
         WRITE (6,1100) (B(I,J),J=1,M)
   25 CONTINUE
      WRITE (6,1300)
      CALL ZBHFUD (A,LNA,N,IPVT,WK,IERR)
      WRITE (6,1400) 'ZBHFUD',IERR
      CALL ZBHFMS (A,LNA,N,B,LNA,M,IPVT,JERR)
      WRITE (6,1400) 'ZBHFMS',JERR
      IF (IERR .GE. 3000) STOP
      WRITE (6,1600)
      DO 30 I = 1, N
         WRITE (6,1100) (B(I,J),J=1,M)
   30 CONTINUE
      STOP
!
 1000 FORMAT(1X,/,/,&
             1X ,'***  ZBHFUD, ZBHFMS  ***',/,/,&
             1X,1X,'**  INPUT  **',/,/,&
             1X,5X,'N =',I3,/,&
             1X,5X,'M =',I3,/,&
             /,1X,5X,'COEFFICIENT MATRIX')
 1100 FORMAT(1X,6X,4('(',F8.4,',',F8.4,')'))
 1200 FORMAT(/,1X,5X,'CONSTANT VECTORS')
 1300 FORMAT(/,1X,1X,'**  OUTPUT  **',/)
 1400 FORMAT(1X,5X,'ERR (',A6,') =',I5)
 1600 FORMAT(/,1X,5X,'SOLUTION')
      END
```

(d) 出力結果

```
***  ZBHFUD, ZBHFMS  ***

 **  INPUT  **

     N =  4
     M =  4

     COEFFICIENT MATRIX
      (  9.0000,  0.0000)(  7.0000,  3.0000)(  2.0000,  5.0000)(  1.0000,  1.0000)
      (  7.0000, -3.0000)( 10.0000,  0.0000)(  3.0000,  2.0000)(  2.0000,  4.0000)
      (  2.0000, -5.0000)(  3.0000, -2.0000)(  8.0000,  0.0000)(  5.0000,  1.0000)
      (  1.0000, -1.0000)(  2.0000, -4.0000)(  5.0000, -1.0000)(  6.0000,  0.0000)

     CONSTANT VECTORS
      ( 10.0000,  6.0000)(  8.0000, 18.0000)(  0.0000, 22.0000)(  2.0000, 10.0000)
      ( 11.0000,  2.0000)( 12.0000, 11.0000)(  8.0000, 23.0000)(  7.0000, 14.0000)
      (  4.0000,  6.0000)( 15.0000,  5.0000)( 20.0000,  6.0000)(  9.0000,  7.0000)
      (  4.0000,  6.0000)(  8.0000,  2.0000)( 16.0000,  2.0000)( 12.0000,  6.0000)

 **  OUTPUT  **

     ERR (ZBHFUD) =    0
     ERR (ZBHFMS) =    0

     SOLUTION
      (  1.0000,  0.0000)( -0.0000,  1.0000)(  0.0000,  1.0000)(  1.0000,  0.0000)
      (  1.0000,  0.0000)(  1.0000, -0.0000)( -0.0000,  1.0000)(  0.0000,  1.0000)
      ( -0.0000,  1.0000)(  1.0000, -0.0000)(  1.0000,  0.0000)(  0.0000,  1.0000)
      ( -0.0000,  1.0000)(  0.0000,  1.0000)(  1.0000, -0.0000)(  1.0000, -0.0000)
```

### 2.11.6 ZBHFDI, CBHFDI<br>エルミート行列の行列式と逆行列

(1) **機 能**

修正コレスキー法で LDL* 分解されたエルミート行列 $A$ (2 次元配列型) (上三角型) の行列式と逆行列を求める.

(2) **使用法**

倍精度サブルーチン:

CALL ZBHFDI (A, LNA, N, IPVT, DET, ISW, W1, IERR)

単精度サブルーチン:

CALL CBHFDI (A, LNA, N, IPVT, DET, ISW, W1, IERR)

(3) **引 数**

D:倍精度実数型　Z:倍精度複素数型　I: {32 ビット整数版では INTEGER(4), 64 ビット整数版では INTEGER(8)}
R:単精度実数型　C:単精度複素数型

| 項番 | 引数名 | 型 | 大きさ | 入出力 | 内　　容 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | A | {Z, C} | LNA, N | 入 力 | LDL* 分解後のエルミート行列 $A$(2 次元配列型)(上三角型) (注意事項 (a), (b) 参照) |
| | | | | 出 力 | 行列 $A$ の逆行列 (注意事項 (b) 参照) |
| 2 | LNA | I | 1 | 入 力 | 配列 A の整合寸法 |
| 3 | N | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の次数 |
| 4 | IPVT | I | N | 入 力 | ピボッティング情報 IPVT(i) :<br>i 段目の処理において行 (列)i と交換した行 (列) の番号 (注意事項 (d) 参照) |
| 5 | DET | {D, R} | 2 | 出 力 | 行列 $A$ の行列式の値 (注意事項 (c) 参照) |
| 6 | ISW | I | 1 | 入 力 | 処理スイッチ<br>ISW>0:行列式の値を求める.<br>ISW=0:行列式の値と逆行列を求める.<br>ISW<0:逆行列を求める. |
| 7 | W1 | {Z, C} | N | ワーク | 作業領域 |
| 8 | IERR | I | 1 | 出 力 | エラーインディケータ |

(4) **制限条件**

(a) $0 < \mathrm{N} \leq \mathrm{LNA}$

(5) **エラーインディケータ**

| IERR の値 | 意　　　　味 | 処　理　内　容 |
|---|---|---|
| 0 | 正常終了. | |
| 1000 | $\mathrm{N}=1$ であった. | $\mathrm{DET}(1) \leftarrow \mathrm{A}(1,1)$<br>$\mathrm{DET}(2) \leftarrow 0.0$<br>$\mathrm{A}(1,1) \leftarrow 1.0/\mathrm{A}(1,1)$ とする. |
| 3000 | 制限条件 (a) を満足しなかった. | 処理を打ち切る. |

(6) **注意事項**

(a) このサブルーチンを使用するには, 係数行列 $A$ を $\mathrm{LDL}^*$ 分解しておく必要がある.
分解は, 2.11.2 $\left\{\begin{matrix}\text{ZBHFUD}\\ \text{CBHFUD}\end{matrix}\right\}$, 2.11.3 $\left\{\begin{matrix}\text{ZBHFUC}\\ \text{CBHFUC}\end{matrix}\right\}$, 2.11.1 $\left\{\begin{matrix}\text{ZBHFSL}\\ \text{CBHFSL}\end{matrix}\right\}$ のいずれかで行えばよい.

(b) 配列 A には, 上三角行列 $L^*$ が格納されていなければならない. 対角行列 $D$, および下三角行列 $L$ は $L^*$ より算出されるので, 配列 A には格納されていなくてよい. 逆行列 $A^{-1}$ はやはりエルミート行列であるので, 上三角部分のみが $A$ に格納される (2.11.1 図 2−11 参照).

(c) 行列式の値は次の式で与えられる.
$det(A) = \mathrm{DET}(1) \times 10^{\mathrm{DET}(2)}$
このとき, $1.0 \leq |\mathrm{DET}(1)| < 10.0$ となるようにスケーリングされている.

(d) IPVT には, $\mathrm{LDL}^*$ 分解時に行った部分軸選択 (partial pivoting) についての情報が格納されていなければならない. この情報は行列 $A$ の $LDL^*$ 分解を行うサブルーチンによって与えられる.

(e) **行列の次数が 100 以下など十分に小さい場合や, 逆行列そのものが必要である場合を除いて, 逆行列を計算すべきではない.** 数値計算では多くの場合, 逆行列は, $A^{-1}\boldsymbol{b}$ や $A^{-1}B$ といった形式で現れるが, これらはそれぞれ, ベクトル $\boldsymbol{x}$ についての連立 1 次方程式 $A\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$, 行列 $X$ についての多重右辺連立 1 次方程式 $AX=B$ として連立 1 次方程式を解いて計算すべきである. 数学的には, 逆行列を求めて逆行列とベクトルの積や逆行列と行列の積を計算することと前述のような連立 1 次方程式を解くことは同じであるが, 数値計算上は一般に, 逆行列による求解は計算効率も悪く, 計算精度も劣る.

## 2.11.7 ZBHFLX, CBHFLX 連立 1 次方程式の解の改良 (エルミート行列)

(1) **機 能**

エルミート行列 $A$ (2 次元配列型) (上三角型) を係数行列とする連立 1 次方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ の解を反復法により改良する.

(2) **使用法**

倍精度サブルーチン:

CALL ZBHFLX (A, LNA, N, AL, B, X, ITOL, NIT, IPVT, W1, IERR)

単精度サブルーチン:

CALL CBHFLX (A, LNA, N, AL, B, X, ITOL, NIT, IPVT, W1, IERR)

(3) **引 数**

D:倍精度実数型　Z:倍精度複素数型
R:単精度実数型　C:単精度複素数型
I: $\left\{\begin{array}{l}\text{32 ビット整数版では INTEGER(4)}\\ \text{64 ビット整数版では INTEGER(8)}\end{array}\right\}$

| 項番 | 引数名 | 型 | 大きさ | 入出力 | 内容 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | A | $\begin{Bmatrix}\mathrm{Z}\\ \mathrm{C}\end{Bmatrix}$ | LNA, N | 入 力 | 係数行列 $A$(エルミート行列, 2 次元配列型, 上三角型) |
| 2 | LNA | I | 1 | 入 力 | 配列 A, AL の整合寸法 |
| 3 | N | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の次数 |
| 4 | AL | $\begin{Bmatrix}\mathrm{Z}\\ \mathrm{C}\end{Bmatrix}$ | LNA, N | 入 力 | $\mathrm{LDL}^*$ 分解後の係数行列 $A$ (注意事項 (a) 参照) |
| 5 | B | $\begin{Bmatrix}\mathrm{Z}\\ \mathrm{C}\end{Bmatrix}$ | N | 入 力 | 定数ベクトル $\boldsymbol{b}$ |
| 6 | X | $\begin{Bmatrix}\mathrm{Z}\\ \mathrm{C}\end{Bmatrix}$ | N | 入 力 | 近似解 $\boldsymbol{x}$ |
| | | | | 出 力 | 反復改良された解 $\boldsymbol{x}$ |
| 7 | ITOL | I | 1 | 入 力 | 反復改良したい桁数 (注意事項 (b) 参照) |
| | | | | 出 力 | 反復改良された桁数の近似値 (注意事項 (c) 参照) |
| 8 | NIT | I | 1 | 入 力 | 最大反復回数 (注意事項 (d) 参照) |
| 9 | IPVT | I | N | 入 力 | ピボッティング情報 (注意事項 (a) 参照) |
| 10 | W1 | $\begin{Bmatrix}\mathrm{Z}\\ \mathrm{C}\end{Bmatrix}$ | N | ワーク | 作業領域 |
| 11 | IERR | I | 1 | 出 力 | エラーインディケータ |

(4) **制限条件**

(a) $0 < \mathrm{N} \leq \mathrm{LNA}$

(5) **エラーインディケータ**

| IERR の値 | 意　　　　味 | 処　理　内　容 |
|---|---|---|
| 0 | 正常終了. | |
| 1000 | N=1 であった. | 解は改良されない. |
| 3000 | 制限条件 (a) を満足しなかった. | 処理を打ち切る. |
| 5000 | 最大反復回数以内で収束しなかった. | ITOL の出力値を計算し, 処理を打ち切る. |
| 6000 | 解を改良できなかった. | |

(6) **注意事項**

(a) このサブルーチンは, 2.11.1 $\left\{\begin{matrix}\text{ZBHFSL}\\ \text{CBHFSL}\end{matrix}\right\}$ または 2.11.4 $\left\{\begin{matrix}\text{ZBHFLS}\\ \text{CBHFLS}\end{matrix}\right\}$ によって得られた解を, さらに改良するものである. 従って, 入力として 2.11.3 $\left\{\begin{matrix}\text{ZBHFUC}\\ \text{CBHFUC}\end{matrix}\right\}$, 2.11.1 $\left\{\begin{matrix}\text{ZBHFSL}\\ \text{CBHFSL}\end{matrix}\right\}$ または 2.11.2 $\left\{\begin{matrix}\text{ZBHFUD}\\ \text{CBHFUD}\end{matrix}\right\}$ によって分解された係数行列 $A$ とその時得られたピボッティング情報を与えなければならない.

(b) 解の改良は, 解の上位 ITOL 桁が修正されなくなるまで反復される. ただし, 以下の条件を満たす場合は, 解の修正が下位 1 ビット以下になるまで反復される.
ITOL $\leq 0$ または ITOL $\geq -$ LOG10 $(2 \times \varepsilon)$ ($\varepsilon$ : 誤差判定のための単位)

(c) 反復回数以内で, 要求された桁数が収束しなかった場合, 修正されなくなった桁数の近似値が ITOL に返される.

(d) NIT の入力値が 0 以下の場合, 既定値として 40 がとられる.

## 2.12 エルミート行列 (2 次元配列型) (上三角型) (複素引数型) (軸選択なし)

### 2.12.1 ZBHESL, CBHESL 連立 1 次方程式 (エルミート行列) (軸選択なし)

(1) **機 能**

エルミート行列 $A$ (2 次元配列型) (上三角型) を係数行列とする連立 1 次方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ を修正コレスキー法を用いて解く.

(2) **使用法**

倍精度サブルーチン:

CALL ZBHESL (A, LNA, N, B, IERR)

単精度サブルーチン:

CALL CBHESL (A, LNA, N, B, IERR)

(3) **引 数**

D:倍精度実数型　Z:倍精度複素数型　I: {32 ビット整数版では INTEGER(4) / 64 ビット整数版では INTEGER(8)}
R:単精度実数型　C:単精度複素数型

| 項番 | 引数名 | 型 | 大きさ | 入出力 | 内　容 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | A | {Z, C} | LNA, N | 入 力 | 係数行列 $A$(エルミート行列, 2 次元配列型, 上三角型) |
| | | | | 出 力 | $A = LDL^*$ と分解したときの, 上三角行列 $L^*$ (注意事項 (b) 参照) |
| 2 | LNA | I | 1 | 入 力 | 配列 A の整合寸法 |
| 3 | N | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の次数 |
| 4 | B | {Z, C} | N | 入 力 | 定数ベクトル$\boldsymbol{b}$ |
| | | | | 出 力 | 解$\boldsymbol{x}$ |
| 5 | IERR | I | 1 | 出 力 | エラーインディケータ |

(4) **制限条件**

(a) $0 < \mathrm{N} \leq \mathrm{LNA}$

(5) **エラーインディケータ**

| IERR の値 | 意　　　　味 | 処　理　内　容 |
|---|---|---|
| 0 | 正常終了. | |
| 1000 | N=1 であった. | 配列 A の内容は変更されない.<br>B(1) ← B(1)/A(1, 1) とする. |
| 2100 | 係数行列 A の LDL* 分解の処理において, 対角要素が 0 に近いものがあった. 分解行列を使って求解もしくは逆行列を計算する場合, 精度の良い結果が得られない場合がある. | 処理を続ける. |
| 3000 | 制限条件 (a) を満足しなかった. | 処理を打ち切る. |
| $4000+i$ | 係数行列 $A$ の LDL* 分解の $i$ 段目の処理において, 対角要素が 0.0 となった.<br>$A$ は特異である. | |

(6) **注意事項**

(a) 定数ベクトル$\boldsymbol{b}$のみが異なる複数の連立 1 次方程式を解く場合には, このサブルーチンを一度使用した後, 続けて 2.12.4 $\left\{\begin{matrix}\text{ZBHELS}\\\text{CBHELS}\end{matrix}\right\}$を配列 B の内容のみを変えて使用すればよい. このようにすれば行列 $A$ の LDL* 分解が一度だけしか行われないため, 効率よく解が求まる.

(b) 配列 A の上三角部分に上三角行列 $L^*$ が格納される. 対角行列 $D$, および下三角行列 $L$ は $L^*$ より算出されるので, 配列 A には格納されない. 行列 $L$ は行列 $L^*$ の随伴行列であり, 行列 $D$ は行列 $L^*$ の対角要素の逆数を成分とする対角行列である.

図 2−12　行列 $L^*$ の格納状態と行列 $D$ の内容

行列 $L^*$　　　　行列 $D$

$$\begin{bmatrix} l_{1,1} & l_{2,1} & l_{3,1} & \cdots & l_{5,1} \\ 0.0 & l_{2,2} & l_{3,2} & \cdots & l_{5,2} \\ 0.0 & 0.0 & l_{3,3} & \cdots & l_{5,3} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0.0 & 0.0 & 0.0 & \cdots & l_{5,5} \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} 1/l_{1,1} & 0.0 & 0.0 & \cdots & 0.0 \\ 0.0 & 1/l_{2,2} & 0.0 & \cdots & 0.0 \\ 0.0 & 0.0 & 1/l_{3,3} & \cdots & 0.0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0.0 & 0.0 & 0.0 & \cdots & 1/l_{5,5} \end{bmatrix}$$

$$\Downarrow$$

配列A(LNA, K)の格納状態

$$\text{LNA}\left\updownarrow\begin{array}{ccccc} l_{1,1} & l_{2,1} & l_{3,1} & \cdots & l_{5,1} \\ * & l_{2,2} & l_{3,2} & \cdots & l_{5,2} \\ * & * & l_{3,3} & \cdots & l_{5,3} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ * & * & * & \cdots & l_{5,5} \end{array}\right\updownarrow \text{N}$$

$\leftarrow - - - - - \text{N} - - - - - \rightarrow$

$\leftarrow - - - - - - - \text{K} - - - - - - - \rightarrow$

**備　考**

a.　LNA $\geq$ N, N $\leq$ K を満たさなければならない.

b.　$*$ に対応する入力時の値は保証されない.

(7) **使用例**

(a) 問 題

$$\begin{bmatrix} 9 & 7+3i & 2+5i & 1+i \\ 7-3i & 10 & 3+2i & 2+4i \\ 2-5i & 3-2i & 8 & 5+i \\ 1-i & 2-4i & 5-i & 6 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 10+6i \\ 11+2i \\ 4+6i \\ 4+6i \end{bmatrix}$$

を解く.

(b) 入力データ

係数行列 $A$, LNA $= 11$, N $= 4$, 定数ベクトル$\boldsymbol{b}$

(c) 主プログラム

```
      PROGRAM ABHESL
!     *** EXAMPLE OF ZBHEUC,ZBHELS ***
      IMPLICIT REAL(8) (A-H,O-Z)
      PARAMETER (LNA = 11,LNW = 22)
      COMPLEX(8) A(LNA,LNA),B(LNA),W1(LNW)
!
      READ (5,*) N
      WRITE (6,1000) N
      DO 10 I = 1, N
        READ (5,*) (A(I,J),J=I,N)
   10 CONTINUE
        WRITE (6,2000) (A(1,J),J=1,N)
        WRITE (6,2100) (A(2,J),J=2,N)
        WRITE (6,2200) (A(3,J),J=3,N)
        WRITE (6,2300) (A(4,J),J=4,N)
      READ (5,*) (B(I),I=1,N)
      WRITE (6,1100)
      DO 20 I = 1, N
      WRITE (6,1200) B(I)
   20 CONTINUE
      WRITE (6,1300)
      CALL ZBHEUC (A,LNA,N,COND,W1,IERR)
      WRITE (6,1400) 'ZBHEUC',IERR
      IF (IERR .GE. 3000) STOP
      COND = 1.0D0/COND
      CALL ZBHELS (A,LNA,N,B,KERR)
      WRITE (6,1400) 'ZBHELS',KERR
      WRITE (6,1500) COND
      WRITE (6,1600)
      DO 30 I = 1, N
      WRITE (6,1700) I,B(I)
   30 CONTINUE
      STOP
!
 1000 FORMAT (' ',/,/,' ***  ZBHEUC,ZBHELS  ***',/,2X,'**  INPUT  **',&
             /,6X,'N =',I3,&
             /,6X,'COEFFICIENT MATRIX ( REAL, IMAGINARY )')
 1100 FORMAT (6X,'CONSTANT VECTOR ( REAL, IMAGINARY )')
 1200 FORMAT (6X,' (',F5.1,' ,',F5.1,' )')
 1300 FORMAT (2X,'**  OUTPUT  **')
 1400 FORMAT (6X,'IERR (',A6,') =',I5)
 1500 FORMAT (6X,'CONDITION NUMBER =',D18.10)
 1600 FORMAT (6X,'SOLUTION ( REAL, IMAGINARY )')
 1700 FORMAT (10X,'X(',I2,') = (',D18.10,' ,',D18.10,' )')
 2000 FORMAT (6X,       4(1X,'(',F5.1,' ,',F5.1,1X,')'))
 2100 FORMAT (6X,  16X, 3(1X,'(',F5.1,' ,',F5.1,1X,')'))
 2200 FORMAT (6X,2(16X),2(1X,'(',F5.1,' ,',F5.1,1X,')'))
 2300 FORMAT (6X,3(16X),  1X,'(',F5.1,' ,',F5.1,1X,')' )
      END
```

(d) 出力結果

```
***  ZBHEUC,ZBHELS  ***
 **  INPUT  **
     N =  4
     COEFFICIENT MATRIX ( REAL, IMAGINARY )
      (  9.0 ,  0.0 ) (  7.0 ,  3.0 ) (  2.0 ,  5.0 ) (  1.0 ,  1.0 )
                      ( 10.0 ,  0.0 ) (  3.0 ,  2.0 ) (  2.0 ,  4.0 )
                                      (  8.0 ,  0.0 ) (  5.0 ,  1.0 )
                                                      (  6.0 ,  0.0 )
     CONSTANT VECTOR ( REAL, IMAGINARY )
      ( 10.0 ,  6.0 )
      ( 11.0 ,  2.0 )
      (  4.0 ,  6.0 )
      (  4.0 ,  6.0 )
 **  OUTPUT  **
     IERR (ZBHEUC) =    0
     IERR (ZBHELS) =    0
     CONDITION NUMBER =  0.2998721749D+02
     SOLUTION ( REAL, IMAGINARY )
         X( 1) = (  0.1000000000D+01 ,  0.9868649108D-16 )
         X( 2) = (  0.1000000000D+01 ,  0.9367506770D-16 )
         X( 3) = ( -0.1022363649D-15 ,  0.1000000000D+01 )
         X( 4) = ( -0.0000000000D+00 ,  0.1000000000D+01 )
```

## 2.12.2 ZBHEUD, CBHEUD エルミート行列の LDL* 分解 (軸選択なし)

(1) **機 能**

エルミート行列 $A$ (2 次元配列型) (上三角型) を修正コレスキー法を用いて LDL* 分解する.

(2) **使用法**

倍精度サブルーチン:

CALL ZBHEUD (A, LNA, N, IERR)

単精度サブルーチン:

CALL CBHEUD (A, LNA, N, IERR)

(3) **引 数**

D:倍精度実数型 Z:倍精度複素数型
R:単精度実数型 C:単精度複素数型
I: { 32 ビット整数版では INTEGER(4) / 64 ビット整数版では INTEGER(8) }

| 項番 | 引数名 | 型 | 大きさ | 入出力 | 内　容 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | A | {Z / C} | LNA, N | 入 力 | エルミート行列 $A$(2 次元配列型)(上三角型) |
| | | | | 出 力 | $A = LDL^*$ と分解したときの, 上三角行列 $L^*$ (注意事項 (a) 参照) |
| 2 | LNA | I | 1 | 入 力 | 配列 A の整合寸法 |
| 3 | N | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の次数 |
| 4 | IERR | I | 1 | 出 力 | エラーインディケータ |

(4) **制限条件**

(a) $0 < \mathrm{N} \leq \mathrm{LNA}$

(5) **エラーインディケータ**

| IERR の値 | 意　味 | 処 理 内 容 |
|---|---|---|
| 0 | 正常終了. | |
| 1000 | N=1 であった. | 配列 A の内容は変更されない. |
| 2100 | 係数行列 A の LDL* 分解の処理において, 対角要素が 0 に近いものがあった. 分解行列を使って求解もしくは逆行列を計算する場合, 精度の良い結果が得られない場合がある. | 処理を続ける. |
| 3000 | 制限条件 (a) を満足しなかった. | 処理を打ち切る. |
| $4000 + i$ | $i$ 段目の処理において, 対角要素が 0.0 となった. $A$ は特異である. | |

(6) **注意事項**

(a) 配列 A には, 上三角部分に上三角行列 $L^*$ が格納される. 対角行列 $D$, および下三角行列 $L$ は $L^*$ より算出されるので, 配列 A には格納されない. このサブルーチンは配列 A の上三角部分のみを使用する (2.12.1 図 2−12 参照).

## 2.12.3 ZBHEUC, CBHEUC エルミート行列の LDL* 分解と条件数 (軸選択なし)

(1) **機 能**

エルミート行列 $A$ (2 次元配列型) (上三角型) を 修正コレスキー法を用いて LDL* 分解し, 条件数を求める.

(2) **使用法**

倍精度サブルーチン:

CALL ZBHEUC (A, LNA, N, COND, W1, IERR)

単精度サブルーチン:

CALL CBHEUC (A, LNA, N, COND, W1, IERR)

(3) **引 数**

D:倍精度実数型　Z:倍精度複素数型　I: { 32 ビット整数版では INTEGER(4) / 64 ビット整数版では INTEGER(8) }
R:単精度実数型　C:単精度複素数型

| 項番 | 引数名 | 型 | 大きさ | 入出力 | 内　容 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | A | {Z/C} | LNA, N | 入 力 | エルミート行列 $A$(2 次元配列型)(上三角型) |
| | | | | 出 力 | $A = LDL^*$ と分解したときの, 上三角行列 $L^*$ (注意事項 (a) 参照) |
| 2 | LNA | I | 1 | 入 力 | 配列 A の整合寸法 |
| 3 | N | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の次数 |
| 4 | COND | {D/R} | 1 | 出 力 | 条件数の逆数 |
| 5 | W1 | {Z/C} | N | ワーク | 作業領域 |
| 6 | IERR | I | 1 | 出 力 | エラーインディケータ |

(4) **制限条件**

(a) $0 < \mathrm{N} \leq \mathrm{LNA}$

(5) **エラーインディケータ**

| IERR の値 | 意　　　　　味 | 処　理　内　容 |
|---|---|---|
| 0 | 正常終了. | |
| 1000 | N=1 であった. | 配列 A の内容は変更されない.<br>COND ← 1.0 とする. |
| 2100 | 係数行列 A の LDL* 分解の処理において, 対角要素が 0 に近いものがあった. 分解行列を使って求解もしくは逆行列を計算する場合, 精度の良い結果が得られない場合がある. | 処理を続ける. |
| 3000 | 制限条件 (a) を満足しなかった. | 処理を打ち切る. |
| $4000+i$ | $i$ 段目の処理において, 対角要素が 0.0 となった.<br>$A$ は特異である. | 処理を打ち切る.<br>条件数は求められない. |

(6) **注意事項**

(a) 配列 A には, 上三角部分に上三角行列 $L^*$ が格納される. 対角行列 $D$, および下三角行列 $L$ は $L^*$ より算出されるので, 配列 A には格納されない (2.12.1 図 2−12 参照).

(b) 条件数は $\|A\| \cdot \|A^{-1}\|$ で定義されるが, このサブルーチンで求められるのはその概算値である.

## 2.12.4 ZBHELS, CBHELS 連立 1 次方程式 (LDL* 分解後のエルミート行列) (軸選択なし)

(1) **機 能**

修正コレスキー法で LDL* 分解されたエルミート行列 $A$ (2 次元配列型) (上三角型) を係数行列とする連立 1 次方程式 $LDL^*\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ を解く.

(2) **使用法**

倍精度サブルーチン:

CALL ZBHELS (A, LNA, N, B, IERR)

単精度サブルーチン:

CALL CBHELS (A, LNA, N, B, IERR)

(3) **引 数**

D:倍精度実数型 Z:倍精度複素数型
R:単精度実数型 C:単精度複素数型
I: { 32 ビット整数版では INTEGER(4) / 64 ビット整数版では INTEGER(8) }

| 項番 | 引数名 | 型 | 大きさ | 入出力 | 内容 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | A | {Z / C} | LNA, N | 入 力 | LDL* 分解後の係数行列 $A$ (エルミート行列, 2 次元配列型, 上三角型)(注意事項 (a), (b) 参照) |
| 2 | LNA | I | 1 | 入 力 | 配列 A の整合寸法 |
| 3 | N | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の次数 |
| 4 | B | {Z / C} | N | 入 力 | 定数ベクトル$\boldsymbol{b}$ |
| | | | | 出 力 | 解$\boldsymbol{x}$ |
| 5 | IERR | I | 1 | 出 力 | エラーインディケータ |

(4) **制限条件**

(a) $0 < \mathrm{N} \leq \mathrm{LNA}$

(5) **エラーインディケータ**

| IERR の値 | 意 味 | 処 理 内 容 |
|---|---|---|
| 0 | 正常終了. | |
| 1000 | N = 1 であった. | $\mathrm{B}(1) \leftarrow \mathrm{B}(1)/\mathrm{A}(1,1)$ とする. |
| 3000 | 制限条件 (a) を満足しなかった. | 処理を打ち切る. |

(6) **注意事項**

(a) このサブルーチンを使用するには, 係数行列 $A$ を LDL* 分解しておく必要がある. 通常は 2.12.2 $\left\{\begin{matrix}\text{ZBHEUD}\\ \text{CBHEUD}\end{matrix}\right\}$ を使用して分解するが, 条件数も求めたい場合は 2.12.3 $\left\{\begin{matrix}\text{ZBHEUC}\\ \text{CBHEUC}\end{matrix}\right\}$ を使用する. また, 2.12.1 $\left\{\begin{matrix}\text{ZBHESL}\\ \text{CBHESL}\end{matrix}\right\}$ を使用して同一の係数行列 $A$ を持つ連立 1 次方程式をすでに解いている場合は, その出力として得られる LDL* 分解を利用することもできる. 定数ベクトル $b$ のみが異なる複数の連立 1 次方程式を解く場合には 2.12.5 $\left\{\begin{matrix}\text{ZBHEMS}\\ \text{CBHEMS}\end{matrix}\right\}$ を用いて計算する方が効率良く解が求まる.

(b) 配列 A には, 上三角行列 $L^*$ が格納されていなければならない. 対角行列 $D$ と下三角行列 $L$ は $L^*$ より算出されるので, 配列 A には格納されていなくてよい (2.12.1 図 2−12 参照).

### 2.12.5 ZBHEMS, CBHEMS 多重右辺連立 1 次方程式 (LDL* 分解後のエルミート行列) (軸選択なし)

(1) **機 能**

修正コレスキー法で LDL* 分解されたエルミート行列 $A$ (2 次元配列型) (上三角型) を係数行列とする連立 1 次方程式 $LDL^{*}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b_i} (i = 1, 2, \cdots, m)$ を解く.

(2) **使用法**

倍精度サブルーチン:

CALL ZBHEMS (A, LNA, N, B, LNB, M, IERR)

単精度サブルーチン:

CALL CBHEMS (A, LNA, N, B, LNB, M, IERR)

(3) **引 数**

D:倍精度実数型 Z:倍精度複素数型
R:単精度実数型 C:単精度複素数型
I: {32 ビット整数版では INTEGER(4), 64 ビット整数版では INTEGER(8)}

| 項番 | 引数名 | 型 | 大きさ | 入出力 | 内容 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | A | {Z, C} | LNA, N | 入 力 | LDL* 分解後の係数行列 $A$ (エルミート行列, 2 次元配列型, 上三角型) (注意事項 (a), (b) 参照) |
| 2 | LNA | I | 1 | 入 力 | 配列 AR, AI の整合寸法 |
| 3 | N | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の次数 |
| 4 | B | {Z, C} | LNB, M | 入 力 | 定数ベクトル$\boldsymbol{b_i} (i = 1, 2, \cdots, m)$ |
| | | | | 出 力 | 解$\boldsymbol{x_i} (i = 1, 2, \cdots, m)$ |
| 5 | LNB | I | 1 | 入 力 | 配列 BR, BI の整合寸法 |
| 6 | M | I | 1 | 入 力 | 右辺ベクトルの数 $m$ |
| 7 | IERR | I | 1 | 出 力 | エラーインディケータ |

(4) **制限条件**

(a) $0 < \mathrm{N} \leq \mathrm{LNA}, \mathrm{LNB}$

(b) $\mathrm{M} > 0$

(5) **エラーインディケータ**

| IERR の値 | 意味 | 処理内容 |
|---|---|---|
| 0 | 正常終了. | |
| 1000 | N=1 であった. | $\mathrm{B}(1, \mathrm{i}) \leftarrow \mathrm{B}(1, \mathrm{i})/\mathrm{A}(1, 1)$ $(i = 1, 2, \cdots, m)$ とする. |
| 3000 | 制限条件 (a) を満足しなかった. | 処理を打ち切る. |
| 3010 | 制限条件 (b) を満足しなかった. | |

(6) **注意事項**

(a) このサブルーチンを使用するには, 係数行列 $A$ を LDL* 分解しておく必要がある. 通常は 2.12.2 $\left\{\begin{matrix}\text{ZBHEUD}\\ \text{CBHEUD}\end{matrix}\right\}$ を使用して分解するが, 条件数も求めたい場合は 2.12.3 $\left\{\begin{matrix}\text{ZBHEUC}\\ \text{CBHEUC}\end{matrix}\right\}$ を使用する. また, 2.12.1 $\left\{\begin{matrix}\text{ZBHESL}\\ \text{CBHESL}\end{matrix}\right\}$ を使用して同一の係数行列 $A$ を持つ連立 1 次方程式をすでに解いている場合は, その出力として得られる LDL* 分解を利用することもできる.

(b) 配列 A には, 上三角行列 $L^*$ が格納されていなければならない. 対角行列 $D$ と下三角行列 $L$ は $L^*$ より算出されるので, 配列 A には格納されていなくてよい.
このサブルーチンは配列 A の上三角部分のみを使用する (2.12.1 図 2−12 参照).

(7) **使用例**

(a) 問 題

$$\begin{bmatrix} 9 & 7+3i & 2+5i & 1+1i \\ 7-3i & 10 & 3+2i & 2+4i \\ 2-5i & 3-2i & 8 & 5+1i \\ 1-1i & 2-4i & 5-1i & 6 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_{1,1} & x_{1,2} & x_{1,3} & x_{1,4} \\ x_{2,1} & x_{2,2} & x_{2,3} & x_{2,4} \\ x_{3,1} & x_{3,2} & x_{3,3} & x_{3,4} \\ x_{4,1} & x_{4,2} & x_{4,3} & x_{4,4} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 10+6i & 8+18i & 22i & 2+10i \\ 11+2i & 12+11i & 8+23i & 7+14i \\ 4+6i & 15+5i & 20+6i & 9+7i \\ 4+6i & 8+2i & 16+2i & 12+6i \end{bmatrix}$$

を解く. ただし, $i=\sqrt{-1}$.

(b) 入力データ

LDL* 後の係数行列の $A$, LNA $=11$, N $=4$, M, 定数ベクトル $\boldsymbol{b_i}(i=1,2,\cdots,\mathrm{M})$

(c) 主プログラム

```
      PROGRAM ABHEMS
! *** EXAMPLE OF ZBHEUD, ZBHEMS ***
      IMPLICIT REAL(8) (A-H,O-Z)
      PARAMETER (LNA = 11)
      COMPLEX(8) A, B
      DIMENSION A(LNA,LNA),B(LNA,LNA)
!
      READ (5,*) N
      READ (5,*) M
      WRITE (6,1000) N, M
      DO 10 I = 1, N
         READ (5,*) (A(I,J),J=I,N)
   10 CONTINUE
      DO 15 I = 1, N
         WRITE(6,1100) (DCONJG(A(J,I)), J=1, I-1), (A(I,J), J=I, N)
   15 CONTINUE
      WRITE (6,1200)
      DO 20 J = 1, M
         READ (5,*) (B(I,J),I=1,N)
   20 CONTINUE
      DO 25 I = 1, N
         WRITE (6,1100) (B(I,J),J=1,M)
   25 CONTINUE
      WRITE (6,1300)
      CALL ZBHEUD (A,LNA,N,IERR)
      WRITE (6,1400) 'ZBHEUD',IERR
      CALL ZBHEMS (A,LNA,N,B,LNA,M,JERR)
      WRITE (6,1400) 'ZBHEMS',JERR
      IF (IERR .GE. 3000) STOP
      WRITE (6,1600)
      DO 30 I = 1, N
         WRITE (6,1100) (B(I,J),J=1,M)
   30 CONTINUE
      STOP
!
 1000 FORMAT(1X,/,/,&
             1X ,'***  ZBHEUD, ZBHEMS  ***',/,/,&
             1X,1X,'**  INPUT  **',/,/,&
             1X,5X,'N =',I3,/,&
             1X,5X,'M =',I3,/,&
             /,1X,5X,'COEFFICIENT MATRIX')
 1100 FORMAT(1X,6X,4('(',F8.4,',',F8.4,')'))
 1200 FORMAT(/,1X,5X,'CONSTANT VECTORS')
 1300 FORMAT(/,1X,1X,'**  OUTPUT  **',/)
 1400 FORMAT(1X,5X,'ERR (',A6,') =',I5)
 1600 FORMAT(/,1X,5X,'SOLUTION')
      END
```

(d) 出力結果

```
*** ZBHEUD, ZBHEMS ***

 **  INPUT  **

     N =  4
     M =  4

     COEFFICIENT MATRIX
      (  9.0000,  0.0000)(  7.0000,  3.0000)(  2.0000,  5.0000)(  1.0000,  1.0000)
      (  7.0000, -3.0000)( 10.0000,  0.0000)(  3.0000,  2.0000)(  2.0000,  4.0000)
      (  2.0000, -5.0000)(  3.0000, -2.0000)(  8.0000,  0.0000)(  5.0000,  1.0000)
      (  1.0000, -1.0000)(  2.0000, -4.0000)(  5.0000, -1.0000)(  6.0000,  0.0000)

     CONSTANT VECTORS
      ( 10.0000,  6.0000)(  8.0000, 18.0000)(  0.0000, 22.0000)(  2.0000, 10.0000)
      ( 11.0000,  2.0000)( 12.0000, 11.0000)(  8.0000, 23.0000)(  7.0000, 14.0000)
      (  4.0000,  6.0000)( 15.0000,  5.0000)( 20.0000,  6.0000)(  9.0000,  7.0000)
      (  4.0000,  6.0000)(  8.0000,  2.0000)( 16.0000,  2.0000)( 12.0000,  6.0000)

 **  OUTPUT  **

     ERR (ZBHEUD) =    0
     ERR (ZBHEMS) =    0

     SOLUTION
      (  1.0000,  0.0000)(  0.0000,  1.0000)( -0.0000,  1.0000)(  1.0000,  0.0000)
      (  1.0000,  0.0000)(  1.0000, -0.0000)( -0.0000,  1.0000)(  0.0000,  1.0000)
      ( -0.0000,  1.0000)(  1.0000, -0.0000)(  1.0000,  0.0000)(  0.0000,  1.0000)
      (  0.0000,  1.0000)(  0.0000,  1.0000)(  1.0000, -0.0000)(  1.0000, -0.0000)
```

## 2.12.6 ZBHEDI, CBHEDI エルミート行列の行列式と逆行列 (軸選択なし)

(1) **機 能**

修正コレスキー法で LDL* 分解されたエルミート行列 $A$ (2 次元配列型) (上三角型) の行列式と逆行列を求める.

(2) **使用法**

倍精度サブルーチン:

CALL ZBHEDI (A, LNA, N, DET, ISW, W1, IERR)

単精度サブルーチン:

CALL CBHEDI (A, LNA, N, DET, ISW, W1, IERR)

(3) **引 数**

D:倍精度実数型　Z:倍精度複素数型
R:単精度実数型　C:単精度複素数型
I: { 32 ビット整数版では INTEGER(4) / 64 ビット整数版では INTEGER(8) }

| 項番 | 引数名 | 型 | 大きさ | 入出力 | 内　容 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | A | {Z / C} | LNA, N | 入 力 | LDL* 分解後のエルミート行列 $A$(2 次元配列型)(上三角型) (注意事項 (a), (b) 参照) |
| | | | | 出 力 | 行列 $A$ の逆行列 (注意事項 (b) 参照) |
| 2 | LNA | I | 1 | 入 力 | 配列 A の整合寸法 |
| 3 | N | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の次数 |
| 4 | DET | {D / R} | 2 | 出 力 | 行列 $A$ の行列式の値 (注意事項 (c) 参照) |
| 5 | ISW | I | 1 | 入 力 | 処理スイッチ<br>ISW>0:行列式の値を求める.<br>ISW=0:行列式の値と逆行列を求める.<br>ISW<0:逆行列を求める. |
| 6 | W1 | {Z / C} | N | ワーク | 作業領域 |
| 7 | IERR | I | 1 | 出 力 | エラーインディケータ |

(4) **制限条件**

(a) $0 < \mathrm{N} \leq \mathrm{LNA}$

(5) **エラーインディケータ**

| IERR の値 | 意　　　　味 | 処　理　内　容 |
|---|---|---|
| 0 | 正常終了. | |
| 1000 | N = 1 であった. | DET(1) ← A(1,1)<br>DET(2) ← 0.0<br>A(1,1) ← 1.0/A(1,1) とする. |
| 3000 | 制限条件 (a) を満足しなかった. | 処理を打ち切る. |

(6) **注意事項**

(a) このサブルーチンを使用するには, 係数行列 $A$ を $\mathrm{LDL}^*$ 分解しておく必要がある.
分解は, 2.12.2 $\left\{\begin{matrix}\text{ZBHEUD}\\ \text{CBHEUD}\end{matrix}\right\}$, 2.12.3 $\left\{\begin{matrix}\text{ZBHEUC}\\ \text{CBHEUC}\end{matrix}\right\}$, 2.12.1 $\left\{\begin{matrix}\text{ZBHESL}\\ \text{CBHESL}\end{matrix}\right\}$ のいずれかで行えばよい.

(b) 配列 A には, 上三角行列 $L^*$ が格納されていなければならない. 対角行列 $D$, および下三角行列 $L$ は $L^*$ より算出されるので, 配列 A には格納されていなくてよい. 逆行列 $A^{-1}$ はやはりエルミート行列であるので, 上三角部分のみが $A$ に格納される (2.12.1 図 2−12 参照).

(c) 行列式の値は次の式で与えられる.
$det(A) = \mathrm{DET}(1) \times 10^{\mathrm{DET}(2)}$
このとき, $1.0 \le |\mathrm{DET}(1)| < 10.0$ となるようにスケーリングされている.

(d) **行列の次数が 100 以下など十分に小さい場合や, 逆行列そのものが必要である場合を除いて, 逆行列を計算すべきではない.** 数値計算では多くの場合, 逆行列は, $A^{-1}\boldsymbol{b}$ や $A^{-1}B$ といった形式で現れるが, これらはそれぞれ, ベクトル $\boldsymbol{x}$ についての連立 1 次方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$, 行列 $X$ についての多重右辺連立 1 次方程式 $AX = B$ として連立 1 次方程式を解いて計算すべきである. 数学的には, 逆行列を求めて逆行列とベクトルの積や逆行列と行列の積を計算することと前述のような連立 1 次方程式を解くことは同じであるが, 数値計算上は一般に, 逆行列による求解は計算効率も悪く, 計算精度も劣る.

## 2.12.7 ZBHELX, CBHELX 連立 1 次方程式の解の改良 (エルミート行列) (軸選択なし)

(1) **機 能**

エルミート行列 $A$ (2 次元配列型) (上三角型) を係数行列とする連立 1 次方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ の解を反復法により改良する.

(2) **使用法**

倍精度サブルーチン:

CALL ZBHELX (A, LNA, N, AL, B, X, ITOL, NIT, W1, IERR)

単精度サブルーチン:

CALL CBHELX (A, LNA, N, AL, B, X, ITOL, NIT, W1, IERR)

(3) **引 数**

D:倍精度実数型　Z:倍精度複素数型　I: { 32 ビット整数版では INTEGER(4)
R:単精度実数型　C:単精度複素数型　　 64 ビット整数版では INTEGER(8) }

| 項番 | 引数名 | 型 | 大きさ | 入出力 | 内　容 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | A | {Z, C} | LNA, N | 入 力 | 係数行列 $A$(エルミート行列, 2 次元配列型, 上三角型) |
| 2 | LNA | I | 1 | 入 力 | 配列 A, AL の整合寸法 |
| 3 | N | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の次数 |
| 4 | AL | {Z, C} | LNA, N | 入 力 | $\mathrm{LDL}^*$ 分解後の係数行列 $A$ (注意事項 (a) 参照) |
| 5 | B | {Z, C} | N | 入 力 | 定数ベクトル $\boldsymbol{b}$ |
| 6 | X | {Z, C} | N | 入 力 | 近似解 $\boldsymbol{x}$ |
| | | | | 出 力 | 反復改良された解 $\boldsymbol{x}$ |
| 7 | ITOL | I | 1 | 入 力 | 反復改良したい桁数 (注意事項 (b) 参照) |
| | | | | 出 力 | 反復改良された桁数の近似値 (注意事項 (c) 参照) |
| 8 | NIT | I | 1 | 入 力 | 最大反復回数 (注意事項 (d) 参照) |
| 9 | W1 | {Z, C} | N | ワーク | 作業領域 |
| 10 | IERR | I | 1 | 出 力 | エラーインディケータ |

(4) **制限条件**

(a) $0 < \mathrm{N} \leq \mathrm{LNA}$

(5) **エラーインディケータ**

| IERR の値 | 意　　　味 | 処　理　内　容 |
|---|---|---|
| 0 | 正常終了. | |
| 1000 | N=1 であった. | 解は改良されない. |
| 3000 | 制限条件 (a) を満足しなかった. | 処理を打ち切る. |
| 5000 | 最大反復回数以内で収束しなかった. | ITOL の出力値を計算し, 処理を打ち切る. |
| 6000 | 解を改良できなかった. | |

(6) **注意事項**

(a) このサブルーチンは, 2.12.1 $\left\{\begin{matrix}\text{ZBHESL}\\\text{CBHESL}\end{matrix}\right\}$ または 2.12.4 $\left\{\begin{matrix}\text{ZBHELS}\\\text{CBHELS}\end{matrix}\right\}$ によって得られた解を, さらに改良するものである. 従って, 入力として 2.12.3 $\left\{\begin{matrix}\text{ZBHEUC}\\\text{CBHEUC}\end{matrix}\right\}$, 2.12.1 $\left\{\begin{matrix}\text{ZBHESL}\\\text{CBHESL}\end{matrix}\right\}$ または 2.12.2 $\left\{\begin{matrix}\text{ZBHEUD}\\\text{CBHEUD}\end{matrix}\right\}$ によって分解された係数行列 $A$ を与えなければならない.

(b) 解の改良は, 解の上位 ITOL 桁が修正されなくなるまで反復される. ただし, 以下の条件を満たす場合は, 解の修正が下位 1 ビット以下になるまで反復される.
ITOL $\leq 0$ または ITOL $\geq -$ LOG10 $(2 \times \varepsilon)$ ($\varepsilon$ : 誤差判定のための単位)

(c) 反復回数以内で, 要求された桁数が収束しなかった場合, 修正されなくなった桁数の近似値が ITOL に返される.

(d) NIT の入力値が 0 以下の場合, 既定値として 40 がとられる.

## 2.13 実バンド行列 (バンド型)

### 2.13.1 DBBDSL, RBBDSL
### 連立 1 次方程式 (実バンド行列)

(1) **機 能**

実バンド行列 $A$(バンド型) を係数行列とする連立 1 次方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ をガウス法を用いて解く.

(2) **使用法**

倍精度サブルーチン:

CALL DBBDSL (A, LMA, N, MU, ML, B, IPVT, IERR)

単精度サブルーチン:

CALL RBBDSL (A, LMA, N, MU, ML, B, IPVT, IERR)

(3) **引 数**

D:倍精度実数型　Z:倍精度複素数型　I: {32 ビット整数版では INTEGER(4) / 64 ビット整数版では INTEGER(8)}
R:単精度実数型　C:単精度複素数型

| 項番 | 引数名 | 型 | 大きさ | 入出力 | 内　容 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | A | {D / R} | LMA, N | 入 力 | 係数行列 $A$(実バンド行列, バンド型) (付録 B 参照) |
| | | | | 出 力 | $A = LU$ と分解されたときの, 上三角行列 $U$ および単位下三角行列 $L$(注意事項 (b) 参照) |
| 2 | LMA | I | 1 | 入 力 | 配列 A の整合寸法 |
| 3 | N | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の次数 |
| 4 | MU | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の上バンド幅 |
| 5 | ML | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の下バンド幅 |
| 6 | B | {D / R} | N | 入 力 | 定数ベクトル $\boldsymbol{b}$ |
| | | | | 出 力 | 解 $\boldsymbol{x}$ |
| 7 | IPVT | I | N | 出 力 | ピボッティング情報 IPVT(i):<br>i 段目の処理において行 i と交換した行の番号 (注意事項 (b) 参照) |
| 8 | IERR | I | 1 | 出 力 | エラーインディケータ |

(4) **制限条件**

(a) $\mathrm{N} > 0$

(b) $0 \le \mathrm{MU} \le \mathrm{N} - 1$
$0 \le \mathrm{ML} \le \mathrm{N} - 1$

(c) $\min(2 \times \mathrm{ML} + \mathrm{MU} + 1, \mathrm{N} + \mathrm{ML}) \le \mathrm{LMA}$

(5) **エラーインディケータ**

| IERR の値 | 意　　　　味 | 処　理　内　容 |
|---|---|---|
| 0 | 正常終了. | |
| 1000 | N=1 であった. | 配列 A の内容は変更されない.<br>B(1) ← B(1)/A(1, 1) |
| 3000 | 制限条件 (a), (b) または (c) を満足しなかった. | 処理を打ち切る. |
| $4000 + i$ | 係数行列 $A$ の LU 分解の $i$ 段目の処理において, ピボットが 0.0 となった.<br>$A$ は特異に近い. | |

(6) **注意事項**

(a) 定数ベクトルのみが異なる複数の連立 1 次方程式を解く場合には, このサブルーチンを一度使用した後, 続けて 2.13.4 $\left\{\begin{matrix}\text{DBBDLS}\\\text{RBBDLS}\end{matrix}\right\}$ を配列 B の内容のみを変えて使用すればよい. このようにすれば行列 $A$ の LU 分解が一度だけしか行われないため, 効率よく解が求まる.

(b) このサブルーチンでは, 係数行列 $A$ の LU 分解時に, 部分軸選択 (partial pivoting) が行われている. 第 i 段目のピボット行が第 i 行 ($\mathrm{i} \leq \mathrm{j}$) となった場合, IPVT(i) に j が格納される. またこの時, 行列 $A$ の第 $i$ 行と第 j 行の第 i 列目以降が実際に交換されるため, 配列 A の格納領域は $\mathrm{ML} \times \mathrm{N}$ のサイズだけ増える. 従って, $\mathrm{N} < 2 \times \mathrm{ML} + \mathrm{MU} + 1$ の場合は, 実行列用サブルーチンを使用した方がメモリが少なくてすむ.

図 2−13　LU 分解前後の配列 A の格納状態

配列A(LMA, K)の格納状態

$$\text{LMA}\updownarrow\quad\begin{array}{ccccc} * & a_{2,1} & a_{3,2} & a_{4,3} & a_{5,4} \\ a_{1,1} & a_{2,2} & a_{3,3} & a_{4,4} & a_{5,5} \\ a_{1,2} & a_{2,3} & a_{3,4} & a_{4,5} & * \\ a_{1,3} & a_{2,4} & a_{3,5} & * & * \\ - & - & * & * & * \\ \multicolumn{5}{c}{\leftarrow - - - - - \mathrm{N} - - - - - \rightarrow} \\ \multicolumn{5}{c}{\leftarrow - - - - - - - - \mathrm{K} - - - - - - - - \rightarrow} \end{array}\quad\updownarrow 2\times\text{ML+MU+1}$$

⇓

配列A(LMA, K)の格納状態

$$\text{LMA}\updownarrow\quad\begin{array}{ccccc} * & l_{2,1} & l_{3,2} & l_{4,3} & l_{5,4} \\ u_{1,1} & u_{2,2} & u_{3,3} & u_{4,4} & u_{5,5} \\ u_{1,2} & u_{2,3} & u_{3,4} & u_{4,5} & * \\ u_{1,3} & u_{2,4} & u_{3,5} & * & * \\ u_{1,4} & u_{2,5} & * & * & * \\ \multicolumn{5}{c}{\leftarrow - - - - - \mathrm{N} - - - - - \rightarrow} \\ \multicolumn{5}{c}{\leftarrow - - - - - - - - \mathrm{K} - - - - - - - - \rightarrow} \end{array}\quad\updownarrow 2\times\text{ML+MU+1}$$

**備　考**

a.　$*$ に対応する入力時の値は保証される.

b.　$u_{1,4}$, $u_{2,5}$ は部分軸選択で対応する行が実際に交換された場合に設定される.

c.　MU は上バンド幅, ML は下バンド幅である.

d.　$\mathrm{LMA} \geq 2 \times \mathrm{ML{+}MU{+}1}$, $\mathrm{K} \geq \mathrm{N}$ を満たさなければならない.

(7) **使用例**

(a) 問 題

$$\begin{bmatrix} 1 & -2 & 0 & 0 \\ -1 & 3 & 2 & 0 \\ 1 & -1 & 4 & -2 \\ 0 & 1 & -1 & 7 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} X_1 \\ X_2 \\ X_3 \\ X_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3 \\ -7 \\ 1 \\ 13 \end{bmatrix}$$ を解く.

(b) 入力データ

係数行列 $A$, LMA=11, N=4, MU=1, ML=2, 定数ベクトル$\boldsymbol{b}$

(c) 主プログラム

```
      PROGRAM BBBDSL
! *** EXAMPLE OF DBBDLC,DBBDLS ***
      IMPLICIT REAL(8) (A-H,O-Z)
      PARAMETER (LMA = 11)
      DIMENSION A(LMA,LMA),B(LMA),W1(LMA),IPVT(LMA)
      CHARACTER*50 FMT(4)
!
      DATA FMT /'(7X,2(A11),2(G11.4))',&
                '(7X,  A11, 3(G11.4))',&
                '(7X,       4(G11.4))',&
                '(7X,       3(G11.4),A11)'/
!
      READ (5,*) N,MU,ML
      WRITE (6,1000) N,MU,ML
      DO 10 I = 1, MU+ML+1
         IJ = I - ML - 1
         IF (IJ .LE. 0) THEN
            READ (5,*) (A(I,J),J=ML-I+2,N)
            WRITE (6,FMT(I)) (' ',J=1,ML-I+1),(A(I,J),J=ML-I+2,N)
         ELSE
            READ (5,*) (A(I,J),J=1,N-IJ)
            WRITE (6,FMT(I)) (A(I,J),J=1,N-IJ),(' ',J=N-IJ+1,N)
         ENDIF
   10 CONTINUE
      READ (5,*) (B(I),I=1,N)
      WRITE (6,1200) (B(I),I=1,N)
      WRITE (6,1300)
      CALL DBBDLC (A,LMA,N,MU,ML,IPVT,COND,W1,IERR)
      WRITE (6,1400) 'DBBDLC',IERR
      IF (IERR .GE. 3000) STOP
      COND = 1.0D0/COND
      CALL DBBDLS (A,LMA,N,MU,ML,B,IPVT,KERR)
      WRITE (6,1400) 'DBBDLS',KERR
      WRITE (6,1500) COND
      WRITE (6,1600) (I,B(I),I=1,N)
      STOP
!
 1000 FORMAT(' ',/,/,&
             ' ***  DBBDLC,DBBDLS  ***',/,&
             2X,'**  INPUT  **',/,&
             6X,'N =',I3,/,&
             6X,'UPPER BAND WIDTH =',I3,/,&
             6X,'LOWER BAND WIDTH =',I3,/,&
             6X,'COEFFICIENT MATRIX')
 1200 FORMAT(6X,'CONSTANT VECTOR',/,(7X,F10.4))
 1300 FORMAT(2X,'**  OUTPUT  **')
 1400 FORMAT(6X,'IERR (',A6,') =',I5)
 1500 FORMAT(6X,'CONDITION NUMBER =',D18.10)
 1600 FORMAT(6X,'SOLUTION',/,(8X,'X(',I2,') =',D18.10))
      END
```

(d) 出力結果

```
 ***  DBBDLC,DBBDLS  ***
  **  INPUT  **
      N =  4
      UPPER BAND WIDTH =  1
      LOWER BAND WIDTH =  2
      COEFFICIENT MATRIX
                                    1.000      1.000
                         -1.000    -1.000     -1.000
          1.000      3.000      4.000      7.000
         -2.000      2.000     -2.000
      CONSTANT VECTOR
             3.0000
            -7.0000
             1.0000
            13.0000
  **  OUTPUT  **
      IERR (DBBDLC) =    0
      IERR (DBBDLS) =    0
      CONDITION NUMBER =  0.1245000000D+03
      SOLUTION
        X( 1) = -0.2900000000D+02
        X( 2) = -0.1600000000D+02
        X( 3) =  0.6000000000D+01
        X( 4) =  0.5000000000D+01
```

## 2.13.2 DBBDLU, RBBDLU 実バンド行列の LU 分解

(1) **機 能**

実バンド行列 $A$(バンド型) をガウス法を用いて LU 分解する.

(2) **使用法**

倍精度サブルーチン:

CALL DBBDLU (A, LMA, N, MU, ML, IPVT, IERR)

単精度サブルーチン:

CALL RBBDLU (A, LMA, N, MU, ML, IPVT, IERR)

(3) **引 数**

D:倍精度実数型　Z:倍精度複素数型　I: {32 ビット整数版では INTEGER(4) / 64 ビット整数版では INTEGER(8)}
R:単精度実数型　C:単精度複素数型

| 項番 | 引数名 | 型 | 大きさ | 入出力 | 内　　容 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | A | {D / R} | LMA, N | 入 力 | 実バンド行列 $A$(バンド型) (付録 B 参照) |
| | | | | 出 力 | $A = LU$ と分解されたときの, 上三角行列 $U$ および単位下三角行列 L(注意事項 (a), (b) 参照) |
| 2 | LMA | I | 1 | 入 力 | 配列 A の整合寸法 |
| 3 | N | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の次数 |
| 4 | MU | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の上バンド幅 |
| 5 | ML | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の下バンド幅 |
| 6 | IPVT | I | N | 出 力 | ピボッティング情報 IPVT(i): i 段目の処理において行 i と交換した行の番号 (注意事項 (b) 参照) |
| 7 | IERR | I | 1 | 出 力 | エラーインディケータ |

(4) **制限条件**

(a) $\mathrm{N} > 0$

(b) $0 \leq \mathrm{MU} \leq \mathrm{N} - 1$
$0 \leq \mathrm{ML} \leq \mathrm{N} - 1$

(c) $\min(2 \times \mathrm{ML} + \mathrm{MU} + 1, \mathrm{N} + \mathrm{ML}) \leq \mathrm{LMA}$

(5) **エラーインディケータ**

| IERR の値 | 意　　味 | 処 理 内 容 |
|---|---|---|
| 0 | 正常終了. | |
| 1000 | N = 1 であった. | 配列 A の内容は変更されない. |
| 3000 | 制限条件 (a), (b) または (c) を満足しなかった. | 処理を打ち切る. |
| $4000 + i$ | $i$ 段目の処理において, ピボットが 0.0 となった. $A$ は特異に近い. | |

(6) **注意事項**

(a) 配列 A には, 単位下三角行列 $L$ と上三角行列 $U$ がバンド型で格納される．ただし, $L$ の対角要素は常に 1.0 なので, 配列 A には格納されない (2.13.1 図 2−13 参照).

(b) このサブルーチンにおいては, 部分軸選択 (partial pivoting) が行われている．この時の情報は後続のサブルーチンで使用されるため, 配列 IPVT に格納される．第 i 段目のピボット行が第 j 行 ($\mathrm{i} \leq \mathrm{j}$) となった場合, IPVT(i) には j が格納される．またこのとき, 行列 $A$ の第 i 行と第 j 行の第 i 列目以降が実際に交換されるため, 配列 A 中の格納領域は $\mathrm{ML} \times \mathrm{N}$ のサイズだけ増える．従って, $\mathrm{N} < 2 \times \mathrm{ML} + \mathrm{MU} + 1$ の場合は, 実行列用サブルーチンを使用した方がメモリが少なくてすむ (2.13.1 図 2−13 参照).

## 2.13.3 DBBDLC, RBBDLC
## 実バンド行列の LU 分解と条件数

(1) **機 能**

実バンド行列 A(バンド型) をガウス法を用いて LU 分解し, 条件数を求める.

(2) **使用法**

倍精度サブルーチン:

CALL DBBDLC (A, LMA, N, MU, ML, IPVT, COND, W1, IERR)

単精度サブルーチン:

CALL RBBDLC (A, LMA, N, MU, ML, IPVT, COND, W1, IERR)

(3) **引 数**

D:倍精度実数型 Z:倍精度複素数型
R:単精度実数型 C:単精度複素数型
I: {32 ビット整数版では INTEGER(4) / 64 ビット整数版では INTEGER(8)}

| 項番 | 引数名 | 型 | 大きさ | 入出力 | 内 容 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | A | {D/R} | LMA, N | 入 力 | 実バンド行列 $A$(バンド型) (付録 B 参照) |
| | | | | 出 力 | $A = LU$ と分解したときの, 上三角行列 $U$ および単位下三角行列 $L$(注意事項 (a), (b) 参照) |
| 2 | LMA | I | 1 | 入 力 | 配列 A の整合寸法 |
| 3 | N | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の次数 |
| 4 | MU | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の上バンド幅 |
| 5 | ML | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の下バンド幅 |
| 6 | IPVT | I | N | 出 力 | ピボッティング情報 IPVT(i): i 段目の処理において行 i と交換した行の番号 (注意事項 (b) 参照) |
| 7 | COND | {D/R} | 1 | 出 力 | 条件数の逆数 |
| 8 | W1 | {D/R} | N | ワーク | 作業領域 |
| 9 | IERR | I | 1 | 出 力 | エラーインディケータ |

(4) **制限条件**

(a) $\mathrm{N} > 0$

(b) $0 \leq \mathrm{MU} \leq \mathrm{N} - 1$
$0 \leq \mathrm{ML} \leq \mathrm{N} - 1$

(c) $\min(2 \times \mathrm{ML} + \mathrm{MU} + 1, \mathrm{N} + \mathrm{ML}) \leq \mathrm{LMA}$

(5) **エラーインディケータ**

| IERR の値 | 意　　　　　　味 | 処　理　内　容 |
|---|---|---|
| 0 | 正常終了. | |
| 1000 | N = 1 であった. | 配列 A の内容は変更されない. |
| 3000 | 制限条件 (a), (b) または (c) を満足しなかった. | 処理を打ち切る. |
| $4000 + i$ | $i$ 段目の処理において, ピボットが 0.0 となった.<br>$A$ は特異に近い. | 処理を打ち切る.<br>条件数は求められない. |

(6) **注意事項**

(a) 配列 A には, 単位下三角行列 $L$ と上三角行列 $U$ がバンド型で格納される. ただし, $L$ の対角要素は常に 1.0 なので, 配列 A には格納されない (2.13.1 図 2−13 参照).

(b) このサブルーチンにおいては, 部分軸選択 (partial pivoting) が行われている. この時の情報は後続のサブルーチンで使用されるため, 配列 IPVT に格納される. 第 i 段目のピボット行が第 j 行 (i ≤ j) となった場合, IPVT(i) には j が格納される. またこのとき, 行列 $A$ の第 i 行と第 j 行の第 i 列目以降が実際に交換されるため, 配列 A 中の格納領域は ML × N のサイズだけ増える. 従って, N < 2 × ML + MU + 1 の場合は, 実行列用サブルーチンを使用した方がメモリが少なくてすむ (2.13.1 図 2−13 参照).

(c) 条件数は $\|A\| \cdot \|A^{-1}\|$ で定義されるが, このサブルーチンで求められるのはその概算値である.

## 2.13.4 DBBDLS, RBBDLS<br>連立 1 次方程式 (LU 分解後の実バンド行列)

(1) **機 能**

ガウス法で LU 分解された実バンド行列 $A$(バンド型) を係数行列とする連立 1 次方程式 $LU\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ を解く.

(2) **使用法**

倍精度サブルーチン:

CALL DBBDLS (A, LMA, N, MU, ML, B, IPVT, IERR)

単精度サブルーチン:

CALL RBBDLS (A, LMA, N, MU, ML, B, IPVT, IERR)

(3) **引 数**

D:倍精度実数型　Z:倍精度複素数型　I: { 32 ビット整数版では INTEGER(4) / 64 ビット整数版では INTEGER(8) }
R:単精度実数型　C:単精度複素数型

| 項番 | 引数名 | 型 | 大きさ | 入出力 | 内　容 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | A | {D/R} | LMA, N | 入 力 | LU 分解後の係数行列 $A$(実バンド行列, バンド型) (付録 B 参照) (注意事項 (a), (b) 参照) |
| 2 | LMA | I | 1 | 入 力 | 配列 A の整合寸法 |
| 3 | N | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の次数 |
| 4 | MU | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の上バンド幅 |
| 5 | ML | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の下バンド幅 |
| 6 | B | {D/R} | N | 入 力 | 定数ベクトル$\boldsymbol{b}$ |
| | | | | 出 力 | 解$\boldsymbol{x}$ |
| 7 | IPVT | I | N | 入 力 | ピボッティング情報 IPVT(i): LU 分解の i 段目の処理において行 i と交換した行の番号 (注意事項 (c) 参照) |
| 8 | IERR | I | 1 | 出 力 | エラーインディケータ |

(4) **制限条件**

(a) $\mathrm{N} > 0$

(b) $0 \leq \mathrm{MU} \leq \mathrm{N} - 1$
$0 \leq \mathrm{ML} \leq \mathrm{N} - 1$

(c) $\min(2 \times \mathrm{ML} + \mathrm{MU} + 1, \mathrm{N} + \mathrm{ML}) \leq \mathrm{LMA}$

(5) **エラーインディケータ**

| IERR の値 | 意　　　　　味 | 処　理　内　容 |
|---|---|---|
| 0 | 正常終了. | |
| 1000 | N=1 であった. | B(1) ← B(1)/A(1, 1) とする. |
| 3000 | 制限条件 (a), (b) または (c) を満足しなかった. | 処理を打ち切る. |
| $4000+i$ | $L$ が 0.0 の対角要素を持つ.<br>$i$ は 0.0 である最初の対角要素の番号である. | |

(6) **注意事項**

(a) 2.13.2 $\left\{\begin{matrix}\text{DBBDLU}\\\text{RBBDLU}\end{matrix}\right\}$を使用して分解するが, 条件数も求めたい場合は 2.13.3 $\left\{\begin{matrix}\text{DBBDLC}\\\text{RBBDLC}\end{matrix}\right\}$を使用する. また, 2.13.1 $\left\{\begin{matrix}\text{DBBDSL}\\\text{RBBDSL}\end{matrix}\right\}$を使用して同一の係数行列 $A$ を持つ連立方程式を, すでに解いている場合は, その出力として得られる LU 分解を利用することもできる.

(b) 配列 A には, 単位下三角行列 $L$ と上三角行列 $U$ がバンド型で格納されていなければならない. ただし, 行列 $L$ の対角要素は常に 1.0 であるので, 配列 A には格納されていなくてよい (2.13.1 図 2−13 参照).

(c) IPVT には, LU 分解時に行った部分軸選択 (partial pivoting) についての情報が格納されていなければならない. この情報は行列 $A$ の LU 分解を行う 2.13.2 $\left\{\begin{matrix}\text{DBBDLU}\\\text{RBBDLU}\end{matrix}\right\}$, 2.13.3 $\left\{\begin{matrix}\text{DBBDLC}\\\text{RBBDLC}\end{matrix}\right\}$, 2.13.1 $\left\{\begin{matrix}\text{DBBDSL}\\\text{RBBDSL}\end{matrix}\right\}$によって与えられる.

## 2.13.5 DBBDDI, RBBDDI 実バンド行列の行列式

(1) **機 能**

ガウス法で LU 分解された実バンド行列 $A$(バンド型) の行列式を求める.

(2) **使用法**

倍精度サブルーチン:

CALL DBBDDI (A, LMA, N, MU, ML, IPVT, DET, IERR)

単精度サブルーチン:

CALL RBBDDI (A, LMA, N, MU, ML, IPVT, DET, IERR)

(3) **引 数**

D:倍精度実数型　Z:倍精度複素数型　I: { 32 ビット整数版では INTEGER(4) / 64 ビット整数版では INTEGER(8) }
R:単精度実数型　C:単精度複素数型

| 項番 | 引数名 | 型 | 大きさ | 入出力 | 内　容 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | A | {D/R} | LMA, N | 入 力 | LU 分解後の実バンド行列 $A$(バンド型) (付録 B 参照) (注意事項 (a), (b) 参照) |
| 2 | LMA | I | 1 | 入 力 | 配列 A の整合寸法 |
| 3 | N | I | 1 | 入 力 | 行列 A の次数 |
| 4 | MU | I | 1 | 入 力 | 行列 A の上バンド幅 |
| 5 | ML | I | 1 | 入 力 | 行列 A の下バンド幅 |
| 6 | IPVT | I | N | 入 力 | ピボッティング情報 IPVT(i):<br>LU 分解の i 段目の処理において行 i と交換した行の番号 (注意事項 (c) 参照) |
| 7 | DET | {D/R} | 2 | 出 力 | 行列 $A$ の行列式の値 (注意事項 (d) 参照) |
| 8 | IERR | I | 1 | 出 力 | エラーインディケータ |

(4) **制限条件**

(a) $\mathrm{N} > 0$

(b) $0 \leq \mathrm{MU} \leq \mathrm{N}-1$
$0 \leq \mathrm{ML} \leq \mathrm{N}-1$

(c) $\min(2 \times \mathrm{ML} + \mathrm{MU} + 1, \mathrm{N} + \mathrm{ML}) \leq \mathrm{LMA}$

(5) **エラーインディケータ**

| IERR の値 | 意　味 | 処 理 内 容 |
|---|---|---|
| 0 | 正常終了. | |
| 1000 | N=1 であった. | DET(1) ← A(1, 1)<br>DET(2) ← 0.0 |
| 3000 | 制限条件 (a), (b) または (c) を満足しなかった. | 処理を打ち切る. |

(6) **注意事項**

(a) このサブルーチンを使用するには, 係数行列 $A$ を LU 分解しておく必要がある.
分解は 2.13.2 $\left\{\begin{matrix}\text{DBBDLU}\\\text{RBBDLU}\end{matrix}\right\}$, 2.13.3 $\left\{\begin{matrix}\text{DBBDLC}\\\text{RBBDLC}\end{matrix}\right\}$, 2.13.1 $\left\{\begin{matrix}\text{DBBDSL}\\\text{RBBDSL}\end{matrix}\right\}$のいずれかで行えばよい.

(b) 入力時の配列 A には, 単位下三角行列 $L$, および上三角行列 $U$ が格納されていなければならない. ただし, 行列 $L$ の対角成分は常に 1.0 であるので, 配列 A には格納されていなくてよい (2.13.1 図 2−13 参照).

(c) IPVT には, LU 分解時に行った部分軸選択 (partial pivoting) についての情報が格納されていなければならない. この情報は行列 $A$ の LU 分解を行うサブルーチンによって与えられる.

(d) 行列式の値は次の式によって与えられる.
$det(A) = \text{DET}(1) \times 10^{\text{DET}(2)}$
このとき, $1.0 \leq |\text{DET}(1)| < 10.0$ となるようにスケーリングされている.

(e) バンド行列の逆行列は一般に密行列であるため, このサブルーチンにおいては求められない.

## 2.13.6 DBBDLX, RBBDLX
## 連立 1 次方程式の解の改良 (実バンド行列)

(1) **機 能**

実バンド行列 $A$(バンド型) を係数行列とする連立 1 次方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ の解を反復法により改良する.

(2) **使用法**

倍精度サブルーチン:

CALL DBBDLX (A, LMA, N, MU, ML, ALU, B, X, ITOL, NIT, IPVT, W1, IERR)

単精度サブルーチン:

CALL RBBDLX (A, LMA, N, MU, ML, ALU, B, X, ITOL, NIT, IPVT, W1, IERR)

(3) **引 数**

D:倍精度実数型　Z:倍精度複素数型　I: {32 ビット整数版では INTEGER(4) / 64 ビット整数版では INTEGER(8)}
R:単精度実数型　C:単精度複素数型

| 項番 | 引数名 | 型 | 大きさ | 入出力 | 内　容 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | A | {D/R} | LMA, N | 入 力 | 係数行列 $A$(実バンド行列, バンド型) (付録 B 参照) |
| 2 | LMA | I | 1 | 入 力 | 配列 A, ALU の整合寸法 |
| 3 | N | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の次数 |
| 4 | MU | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の上バンド幅 |
| 5 | ML | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の下バンド幅 |
| 6 | ALU | {D/R} | LMA, N | 入 力 | LU 分解後の係数行列 $A$(注意事項 (a) 参照) |
| 7 | B | {D/R} | N | 入 力 | 定数ベクトル $\boldsymbol{b}$ |
| 8 | X | {D/R} | N | 入 力 | 近似解 $\boldsymbol{x}$ |
| | | | | 出 力 | 反復改良された解 $\boldsymbol{x}$ |
| 9 | ITOL | I | 1 | 入 力 | 反復改良したい桁数 (注意事項 (b) 参照) |
| | | | | 出 力 | 反復改良された桁数の近似値 (注意事項 (c) 参照) |
| 10 | NIT | I | 1 | 入 力 | 最大反復回数 (注意事項 (d) 参照) |
| 11 | IPVT | I | N | 入 力 | ピボッティング情報 (注意事項 (a) 参照) |
| 12 | W1 | {D/R} | N | ワーク | 作業領域 |
| 13 | IERR | I | 1 | 出 力 | エラーインディケータ |

(4) **制限条件**

(a) $\mathrm{N} > 0$

(b) $0 \leq \mathrm{MU} \leq \mathrm{N} - 1$
$0 \leq \mathrm{ML} \leq \mathrm{N} - 1$

(c) $\min(2 \times \mathrm{ML} + \mathrm{MU} + 1, \mathrm{N} + \mathrm{ML}) \leq \mathrm{LMA}$

(5) **エラーインディケータ**

| IERR の値 | 意　　味 | 処 理 内 容 |
|---|---|---|
| 0 | 正常終了. | |
| 1000 | N = 1 であった. | 解は改良されない. |
| 3000 | 制限条件 (a), (b) または (c) を満足しなかった. | 処理を打ち切る. |
| $4000 + i$ | ALU の $i$ 番目の対角要素が 0.0 であった. | |
| 5000 | 最大反復回数以内で収束しなかった. | ITOL の出力値を計算し, 処理を打ち切る. |
| 6000 | 解を改良できなかった. | |

(6) **注意事項**

(a) このサブルーチンは, 2.13.1 $\left\{\begin{matrix}\text{DBBDSL}\\\text{RBBDSL}\end{matrix}\right\}$ または 2.13.4 $\left\{\begin{matrix}\text{DBBDLS}\\\text{RBBDLS}\end{matrix}\right\}$ によって得られた解を, さらに改良するものである. 従って, 入力として 2.13.1 $\left\{\begin{matrix}\text{DBBDSL}\\\text{RBBDSL}\end{matrix}\right\}$, 2.13.2 $\left\{\begin{matrix}\text{DBBDLU}\\\text{RBBDLU}\end{matrix}\right\}$ または 2.13.3 $\left\{\begin{matrix}\text{DBBDLC}\\\text{RBBDLC}\end{matrix}\right\}$ によって分解された係数行列 $A$ とそのとき得られたピボッティング情報を与えなければならない.

(b) 解の改良は, 解の上位 ITOL 桁が修正されなくなるまで反復される. ただし, 以下の条件を満たす場合は, 解の修正が下位 1 ビット以下になるまで反復される.
ITOL $\leq 0$ または ITOL $\geq -$ LOG10 $(2 \times \varepsilon)$ ($\varepsilon$ : 誤差判定のための単位)

(c) 反復回数以内で, 要求された桁数が収束しなかった場合, 修正されなくなった桁数の近似値が ITOL に返される.

(d) NIT の入力値が 0 以下の場合, 既定値として 40 がとられる.

(7) **使用例**

(a) 問 題

$$
\begin{bmatrix}
10 & 9 & 8 & 7 & 6 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0\\
9 & 9 & 8 & 7 & 6 & 5 & 0 & 0 & 0 & 0\\
8 & 8 & 8 & 7 & 6 & 5 & 4 & 0 & 0 & 0\\
7 & 7 & 7 & 7 & 6 & 5 & 4 & 3 & 0 & 0\\
6 & 6 & 6 & 6 & 6 & 5 & 4 & 3 & 2 & 0\\
0 & 5 & 5 & 5 & 5 & 5 & 4 & 3 & 2 & 1\\
0 & 0 & 4 & 4 & 4 & 4 & 4 & 3 & 2 & 1\\
0 & 0 & 0 & 3 & 3 & 3 & 3 & 3 & 2 & 1\\
0 & 0 & 0 & 0 & 2 & 2 & 2 & 2 & 2 & 1\\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix} X_1\\ X_2\\ X_3\\ X_4\\ X_5\\ X_6\\ X_7\\ X_8\\ X_9\\ X_{10}\end{bmatrix}
=
\begin{bmatrix} 8\\ 7\\ 2\\ 2\\ 4\\ -2\\ -2\\ 2\\ 2\\ 0\end{bmatrix}
$$

を解き, 解の改良を行う.

(b) 入力データ
係数行列 $A$, LNA=21, N=10, MU=4, ML=4, 定数ベクトル$\boldsymbol{b}$

(c) 主プログラム

```
      PROGRAM  BBBDLX
! *** EXAMPLE OF DBBDLX ***
      IMPLICIT REAL(8)(A-H,O-Z)
      PARAMETER ( LNA=21, LN=10)
      DIMENSION   A(LNA,LN), ALU(LNA,LN), B(LN), X(LN), W1(LN)
      INTEGER     IPVT(LN)
```

```
!
      READ(5,*) N,MU,ML
      WRITE(6,1000) N,MU,ML
      READ(5,*) ((A(I,J),J=1,N),I=1,MU+ML+1)
      READ(5,*) (B(I),I=1,N)
      WRITE(6,1100)
      DO 10 I = 1,MU+ML+1
          WRITE(6,1200) (A(I,J),J=1,N)
   10 CONTINUE
      WRITE(6,1300)
      DO 20 I = 1,N
         WRITE(6,1400) B(I)
   20 CONTINUE
      DO 40 J = 1,N
          X(J) = B(J)
          DO 30 I = 1,MU+ML+1
            ALU(I,J) = A(I,J)
   30     CONTINUE
   40 CONTINUE
      CALL DBBDSL(ALU,LNA,N,MU,ML,X,IPVT,IERR)
      IF(IERR.GE.3000) STOP
      WRITE(6,1500)
      DO 50 I = 1,N
         WRITE(6,1600) I,X(I)
   50 CONTINUE
      ITOL = 0
      CALL DBBDLX(A,LNA,N,MU,ML,ALU,B,X,ITOL,0,IPVT,W1,IERR)
      WRITE(6,1700) IERR
      WRITE(6,1800)
      DO 60 I = 1,N
         WRITE(6,1600) I,X(I)
   60 CONTINUE
      STOP
 1000 FORMAT(' ',/,/,' *** DBBDLX ***',/,2X,'** INPUT **',/,&
             6X,'N = ',I5,/,6X,'MU = ',I4,/,6X,'ML = ',I4)
 1100 FORMAT(6X,'COEFFICIENT MATRIX A')
 1200 FORMAT(8X,10F7.1)
 1300 FORMAT(6X,'CONSTANT VECTOR')
 1400 FORMAT(8X,  F7.1)
 1500 FORMAT(6X,'ORIGINAL SOLUTION')
 1600 FORMAT(8X,'X(',I2,') = ',1PD18.10)
 1700 FORMAT(2X,'** OUTPUT **',/,6X,'IERR = ',I5)
 1800 FORMAT(6X,'IMPROVED SOLUTION')
      END
```

(d) 出力結果

```
*** DBBDLX ***
 ** INPUT **
     N =    10
     MU =    4
     ML =    4
     COEFFICIENT MATRIX A
           0.0    0.0    0.0    0.0    6.0    5.0    4.0    3.0    2.0    1.0
           0.0    0.0    0.0    7.0    6.0    5.0    4.0    3.0    2.0    1.0
           0.0    0.0    8.0    7.0    6.0    5.0    4.0    3.0    2.0    1.0
           0.0    9.0    8.0    7.0    6.0    5.0    4.0    3.0    2.0    1.0
          10.0    9.0    8.0    7.0    6.0    5.0    4.0    3.0    2.0    1.0
           9.0    8.0    7.0    6.0    5.0    4.0    3.0    2.0    1.0    0.0
           8.0    7.0    6.0    5.0    4.0    3.0    2.0    1.0    0.0    0.0
           7.0    6.0    5.0    4.0    3.0    2.0    1.0    0.0    0.0    0.0
           6.0    5.0    4.0    3.0    2.0    1.0    0.0    0.0    0.0    0.0
     CONSTANT VECTOR
           8.0
           7.0
           2.0
           2.0
           4.0
          -2.0
          -2.0
           2.0
           2.0
           0.0
     ORIGINAL SOLUTION
       X( 1) =   1.0000000000D+00
       X( 2) =   0.0000000000D+00
       X( 3) =  -1.0000000000D+00
       X( 4) =   0.0000000000D+00
       X( 5) =   1.0000000000D+00
       X( 6) =  -3.7848512203D-17
       X( 7) =  -1.0000000000D+00
       X( 8) =  -6.2883389974D-16
       X( 9) =   1.0000000000D+00
       X(10) =   4.8805302754D-16
 ** OUTPUT **
     IERR =     0
     IMPROVED SOLUTION
       X( 1) =   1.0000000000D+00
       X( 2) =   7.8886090522D-32
       X( 3) =  -1.0000000000D+00
       X( 4) =  -6.5738408768D-32
       X( 5) =   1.0000000000D+00
       X( 6) =  -4.9303806576D-32
       X( 7) =  -1.0000000000D+00
       X( 8) =   9.8607613153D-32
       X( 9) =   1.0000000000D+00
       X(10) =   2.9582283946D-31
```

## 2.14 正値対称バンド行列 (対称バンド型)

### 2.14.1 DBBPSL, RBBPSL 連立 1 次方程式 (正値対称バンド行列)

(1) **機 能**

正値対称バンド行列 $A$(対称バンド型) を係数行列とする連立 1 次方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ をコレスキー法を用いて解く.

(2) **使用法**

倍精度サブルーチン:

CALL DBBPSL (A, LMA, N, MB, B, IERR)

単精度サブルーチン:

CALL RBBPSL (A, LMA, N, MB, B, IERR)

(3) **引 数**

D:倍精度実数型　Z:倍精度複素数型
R:単精度実数型　C:単精度複素数型
I: {32 ビット整数版では INTEGER(4), 64 ビット整数版では INTEGER(8)}

| 項番 | 引数名 | 型 | 大きさ | 入出力 | 内容 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | A | {D, R} | LMA, N | 入 力 | 正値対称バンド行列 $A$ (対称バンド型)(付録 B 参照) |
| | | | | 出 力 | $A = LL^T$ と分解したときの, 上三角行列 $L^T$ (注意事項 (b) 参照) |
| 2 | LMA | I | 1 | 入 力 | 配列 A の整合寸法 |
| 3 | N | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の次数 |
| 4 | MB | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ のバンド幅 |
| 5 | B | {D, R} | N | 入 力 | 定数ベクトル$\boldsymbol{b}$ |
| | | | | 出 力 | 解$\boldsymbol{x}$ |
| 6 | IERR | I | 1 | 出 力 | エラーインディケータ |

(4) **制限条件**

(a) $\mathrm{N} > 0$

(b) $0 \leq \mathrm{MB} \leq \mathrm{N} - 1$

(c) $\mathrm{MB} + 1 \leq \mathrm{LMA}$

(5) **エラーインディケータ**

| IERR の値 | 意　　　　　　味 | 処　理　内　容 |
|---|---|---|
| 0 | 正常終了. | |
| 1000 | N=1 であった. | $\mathrm{A}(1,1) \leftarrow \sqrt{\mathrm{A}(1,1)}$<br>$\mathrm{B}(1) \leftarrow \mathrm{B}(1)/\mathrm{A}(1,1)$ とする. |
| 3000 | 制限条件 (a), (b) または (c) を満足しなかった. | 処理を打ち切る. |
| $4000+i$ | 係数行列 $A$ の $\mathrm{LL^T}$ 分解の $i$ 段目の処理において, 対角要素が 0.0 以下となった.<br>$A$ は特異に近い. | |

(6) **注意事項**

(a) 右辺ベクトルのみが異なる複数の連立 1 次方程式を解く場合には, このサブルーチンを一度使用した後, 続けて 2.14.4 $\left\{\begin{matrix}\mathrm{DBBPLS}\\ \mathrm{RBBPLS}\end{matrix}\right\}$ を配列 B の内容のみを変えて使用すればよい. このようにすれば行列 $A$ の $\mathrm{LL^T}$ 分解が一度だけしか行われないため, 効率よく解が求まる.

(b) 配列 A には, 上三角行列 $L^T$ のみが格納される. 下三角行列 $L$ は $L^T$ より算出されるため, 配列 A には格納されない.

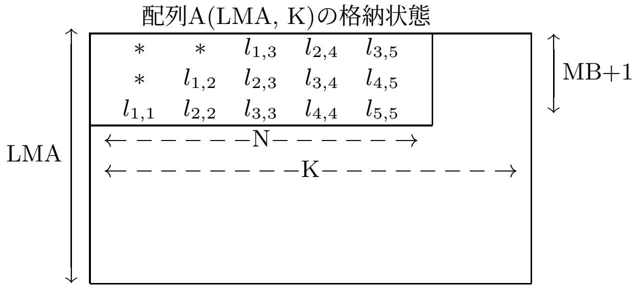
図 2−14　行列 $L^T$ の格納状態

行列 $L^T$

$$\begin{bmatrix} l_{1,1} & l_{1,2} & l_{1,3} & 0 & 0 \\ 0 & l_{2,2} & l_{2,3} & l_{2,4} & 0 \\ 0 & 0 & l_{3,3} & l_{3,4} & l_{3,5} \\ 0 & 0 & 0 & l_{4,4} & l_{4,5} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & l_{5,5} \end{bmatrix}$$

$$\Downarrow$$

配列A(LMA, K)の格納状態




**備　考**
a.　∗ に対応する入力時の値は保証される.
b.　MB は, バンド幅である.
c.　LMA $\geq$ MB+1, K $\geq$ N を満たさなければならない.

(7) **使用例**

(a) 問 題

$$\begin{bmatrix} 10 & -2 & 1 & 0 \\ -2 & 9 & -1 & 2 \\ 1 & -1 & 8 & -3 \\ 0 & 2 & -3 & 7 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 72 \\ 9 \\ 62 \\ -4 \end{bmatrix}$$ を解く.

(b) 入力データ

係数行列 $A$, LMA=11, N=4, MB=2, 定数ベクトル$\boldsymbol{b}$

(c) 主プログラム

```
      PROGRAM BBBPSL
! *** EXAMPLE OF DBBPUC,DBBPLS ***
      IMPLICIT REAL(8) (A-H,O-Z)
      PARAMETER (LMA = 11)
      DIMENSION A(LMA,LMA),B(LMA),W1(LMA)
!
      CHARACTER*50 FMT(3)
!
      DATA FMT /'(7X,2(A11),2(G11.4))',&
                '(7X,  A11, 3(G11.4))',&
                '(7X,       4(G11.4))' /
!
      READ (5,*) N,MB
      WRITE (6,1000) N,MB
      DO 10 I = 1, MB+1
         READ (5,*) (A(I,J),J=MB-I+2,N)
         WRITE (6,FMT(I)) (' ',J=1,MB-I+1),(A(I,J),J=MB-I+2,N)
   10 CONTINUE
      READ (5,*) (B(I),I=1,N)
      WRITE (6,1200) (B(I),I=1,N)
      WRITE (6,1300)
      CALL DBBPUC (A,LMA,N,MB,COND,W1,IERR)
      WRITE (6,1400) 'DBBPUC',IERR
      IF (IERR .GE. 3000) STOP
      COND = 1.0D0/COND
      CALL DBBPLS (A,LMA,N,MB,B,KERR)
      WRITE (6,1400) 'DBBPLS',KERR
      WRITE (6,1500) COND
      WRITE (6,1600) (I,B(I),I=1,N)
      STOP
!
 1000 FORMAT(' ',/,/,&
             ' ***  DBBPUC,DBBPLS  ***',/,&
             2X,'**  INPUT  **',/,&
             6X,'N =',I3,/,&
             6X,'BAND WIDTH =',I3,/,&
             6X,'COEFFICIENT MATRIX')
 1200 FORMAT(6X,'CONSTANT VECTOR',/,(7X,F10.4))
 1300 FORMAT(2X,'**  OUTPUT  **')
 1400 FORMAT(6X,'IERR (',A6,') =',I5)
 1500 FORMAT(6X,'CONDITION NUMBER =',D18.10)
 1600 FORMAT(6X,'SOLUTION',/,(8X,'X(',I2,') =',D18.10))
      END
```

(d) 出力結果

```
***  DBBPUC,DBBPLS  ***
 **  INPUT  **
     N =  4
     BAND WIDTH =  2
     COEFFICIENT MATRIX
                             1.000      2.000
                 -2.000     -1.000     -3.000
        10.00     9.000      8.000      7.000
     CONSTANT VECTOR
         72.0000
          9.0000
         62.0000
         -4.0000
 **  OUTPUT  **
     IERR (DBBPUC) =    0
     IERR (DBBPLS) =    0
     CONDITION NUMBER =  0.3234671497D+01
     SOLUTION
       X( 1) =  0.7000000000D+01
       X( 2) =  0.3000000000D+01
       X( 3) =  0.8000000000D+01
       X( 4) =  0.2000000000D+01
```

## 2.14.2 DBBPUU, RBBPUU 正値対称バンド行列の $\mathrm{LL^T}$ 分解

(1) **機 能**

正値対称バンド行列 $A$(対称バンド型) をコレスキー法を用いて $\mathrm{LL^T}$ 分解する.

(2) **使用法**

倍精度サブルーチン:

CALL DBBPUU (A, LMA, N, MB, IERR)

単精度サブルーチン:

CALL RBBPUU (A, LMA, N, MB, IERR)

(3) **引 数**

D:倍精度実数型 Z:倍精度複素数型
R:単精度実数型 C:単精度複素数型
I: {32 ビット整数版では INTEGER(4) / 64 ビット整数版では INTEGER(8)}

| 項番 | 引数名 | 型 | 大きさ | 入出力 | 内 容 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | A | {D / R} | LMA, N | 入 力 | 正値対称バンド行列 $A$ (対称バンド型) (付録 B 参照) |
| | | | | 出 力 | $A = LL^T$ と分解されたときの, 上三角行列 $L^T$ (注意事項 (a) 参照) |
| 2 | LMA | I | 1 | 入 力 | 配列 A の整合寸法 |
| 3 | N | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の次数 |
| 4 | MB | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ のバンド幅 |
| 5 | IERR | I | 1 | 出 力 | エラーインディケータ |

(4) **制限条件**

(a) $\mathrm{N} > 0$

(b) $0 \leq \mathrm{MB} \leq \mathrm{N} - 1$

(c) $\mathrm{MB} + 1 \leq \mathrm{LMA}$

(5) **エラーインディケータ**

| IERR の値 | 意 味 | 処 理 内 容 |
|---|---|---|
| 0 | 正常終了. | |
| 1000 | N=1 であった. | $\mathrm{A}(1,1) \leftarrow \sqrt{\mathrm{A}(1,1)}$ とする. |
| 3000 | 制限条件 (a), (b) または (c) を満足しなかった. | 処理を打ち切る. |
| $4000 + i$ | $i$ 段目の処理において, 対角要素が 0.0 以下となった. | |

(6) **注意事項**

(a) 配列 A には, 上三角行列 $L^T$ のみが格納される. 下三角行列 $L$ は $L^T$ より算出されるので, 配列 A には格納されない (2.14.1 図 2−14 参照).

## 2.14.3 DBBPUC, RBBPUC 正値対称バンド行列の $\mathrm{LL^T}$ 分解と条件数

(1) **機 能**

正値対称バンド行列 $A$(対称バンド型) をコレスキー法を用いて $\mathrm{LL^T}$ 分解し, 条件数を求める.

(2) **使用法**

倍精度サブルーチン:

CALL DBBPUC (A, LMA, N, MB, COND, W1, IERR)

単精度サブルーチン:

CALL RBBPUC (A, LMA, N, MB, COND, W1, IERR)

(3) **引 数**

D:倍精度実数型　Z:倍精度複素数型　I: { 32 ビット整数版では INTEGER(4) / 64 ビット整数版では INTEGER(8) }
R:単精度実数型　C:単精度複素数型

| 項番 | 引数名 | 型 | 大きさ | 入出力 | 内　容 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | A | {D/R} | LMA, N | 入 力 | 正値対称バンド行列 $A$ (対称バンド型) (付録 B 参照) |
| | | | | 出 力 | $A = LL^T$ と分解したときの, 上三角行列 $L^T$ (注意事項 (a) 参照) |
| 2 | LMA | I | 1 | 入 力 | 配列 A の整合寸法 |
| 3 | N | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の次数 |
| 4 | MB | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ のバンド幅 |
| 5 | COND | {D/R} | 1 | 出 力 | 条件数の逆数 |
| 6 | W1 | {D/R} | N | ワーク | 作業領域 |
| 7 | IERR | I | 1 | 出 力 | エラーインディケータ |

(4) **制限条件**

(a) $\mathrm{N} > 0$

(b) $0 \leq \mathrm{MB} \leq \mathrm{N} - 1$

(c) $\mathrm{MB} + 1 \leq \mathrm{LMA}$

(5) **エラーインディケータ**

| IERR の値 | 意　　　　　味 | 処　理　内　容 |
|---|---|---|
| 0 | 正常終了. | |
| 1000 | N=1 であった. | $\mathrm{A}(1,1) \leftarrow \sqrt{\mathrm{A}(1,1)}$<br>COND ← 1.0 とする. |
| 3000 | 制限条件 (a), (b) または (c) を満足しなかった. | 処理を打ち切る. |
| $4000+i$ | $i$ 段目の処理において, 対角要素が 0.0 以下となった. | 処理を打ち切る.<br>条件数は求められない. |

(6) **注意事項**

(a) 配列 A には, 上三角行列 $L^T$ のみが格納される. 下三角行列 $L$ は $L^T$ より算出されるので, 配列 A には格納されない (2.14.1 図 2−14 参照).

(b) 条件数は $\|A\| \cdot \|A^{-1}\|$ で定義されるが, このサブルーチンで求められるのはその概算値である.

## 2.14.4 DBBPLS, RBBPLS
## 連立 1 次方程式 (LL$^{\mathrm{T}}$ 分解後の正値対称バンド行列)

(1) **機 能**

コレスキー法で LL$^{\mathrm{T}}$ 分解された正値対称バンド行列 (対称バンド型) を係数行列とする連立 1 次方程式 $LL^T\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ を解く.

(2) **使用法**

倍精度サブルーチン:

CALL DBBPLS (A, LMA, N, MB, B, IERR)

単精度サブルーチン:

CALL RBBPLS (A, LMA, N, MB, B, IERR)

(3) **引 数**

D:倍精度実数型　Z:倍精度複素数型
R:単精度実数型　C:単精度複素数型
I: { 32 ビット整数版では INTEGER(4) / 64 ビット整数版では INTEGER(8) }

| 項番 | 引数名 | 型 | 大きさ | 入出力 | 内　容 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | A | {D/R} | LMA, N | 入 力 | LL$^{\mathrm{T}}$ 分解後の係数行列 $A$(正値対称バンド行列, 対称バンド型) (付録 B 参照) (注意事項 (a), (b) 参照) |
| 2 | LMA | I | 1 | 入 力 | 配列 A の整合寸法 |
| 3 | N | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の次数 |
| 4 | MB | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ のバンド幅 |
| 5 | B | {D/R} | N | 入 力 | 定数ベクトル$\boldsymbol{b}$ |
| | | | | 出 力 | 解$\boldsymbol{x}$ |
| 6 | IERR | I | 1 | 出 力 | エラーインディケータ |

(4) **制限条件**

(a) $\mathrm{N} > 0$

(b) $0 \leq \mathrm{MB} \leq \mathrm{N} - 1$

(c) $\mathrm{MB} + 1 \leq \mathrm{LMA}$

(5) **エラーインディケータ**

| IERR の値 | 意　味 | 処 理 内 容 |
|---|---|---|
| 0 | 正常終了. | |
| 1000 | $\mathrm{N} = 1$ であった. | $\mathrm{B}(1) \leftarrow \mathrm{B}(1)/\mathrm{A}(1,1)^2$ とする. |
| 3000 | 制限条件 (a), (b) または (c) を満足しなかった. | 処理を打ち切る. |
| $4000 + i$ | $L^T$ が 0.0 以下の対角要素を持つ. $i$ は, 0.0 以下である最初の対角要素の番号である. | |

### (6) **注意事項**

(a) このサブルーチンを使用するには, 係数行列 $A$ を $\mathrm{LL^T}$ 分解しておく必要がある. 通常は 2.14.2 $\left\{\begin{matrix}\mathrm{DBBPUU}\\ \mathrm{RBBPUU}\end{matrix}\right\}$ を使用して分解するが, 条件数も求めたい場合は 2.14.3 $\left\{\begin{matrix}\mathrm{DBBPUC}\\ \mathrm{RBBPUC}\end{matrix}\right\}$ を使用する. また, 2.14.1 $\left\{\begin{matrix}\mathrm{DBBPSL}\\ \mathrm{RBBPSL}\end{matrix}\right\}$ を使用して同一の係数行列 $A$ を持つ連立 1 次方程式を, すでに解いている場合は, その出力として得られる $\mathrm{LL^T}$ 分解を利用することもできる.

(b) 配列 A には, 上三角行列 $L^T$ が対称バンド型で格納されていなければならない. 下三角行列 $L$ は $L^T$ より算出されるので, 配列 A には格納されていなくてよい (2.14.1 図 2−14 参照).

## 2.14.5 DBBPDI, RBBPDI 正値対称バンド行列の行列式

(1) **機 能**

コレスキー法で $\mathrm{LL^T}$ 分解された正値対称バンド行列 $A$(対称バンド型) の行列式を求める.

(2) **使用法**

倍精度サブルーチン:

CALL DBBPDI (A, LMA, N, MB, DET, IERR)

単精度サブルーチン:

CALL RBBPDI (A, LMA, N, MB, DET, IERR)

(3) **引 数**

D:倍精度実数型　Z:倍精度複素数型
R:単精度実数型　C:単精度複素数型
I: { 32 ビット整数版では INTEGER(4) / 64 ビット整数版では INTEGER(8) }

| 項番 | 引数名 | 型 | 大きさ | 入出力 | 内容 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | A | {D / R} | LMA, N | 入 力 | $\mathrm{LL^T}$ 分解後の上三角行列 $L^T$ (注意事項 (a), (b) 参照) |
| 2 | LMA | I | 1 | 入 力 | 配列 A の整合寸法 |
| 3 | N | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の次数 |
| 4 | MB | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ のバンド幅 |
| 5 | DET | {D / R} | 2 | 出 力 | 行列 $A$ の行列式の値 (注意事項 (c) 参照) |
| 6 | IERR | I | 1 | 出 力 | エラーインディケータ |

(4) **制限条件**

(a) $\mathrm{N} > 0$

(b) $0 \leq \mathrm{MB} \leq \mathrm{N} - 1$

(c) $\mathrm{MB} + 1 \leq \mathrm{LMA}$

(5) **エラーインディケータ**

| IERR の値 | 意味 | 処理内容 |
|---|---|---|
| 0 | 正常終了. | |
| 1000 | N=1 であった. | DET(1) ← A(1, 1)<br>DET(2) ← 0.0 とする. |
| 3000 | 制限条件 (a), (b) または (c) を満足しなかった. | 処理を打ち切る. |

(6) **注意事項**

(a) このサブルーチンを使用するには, 係数行列 $A$ を $\mathrm{LL}^{\mathrm{T}}$ 分解しておく必要がある.
分解は 2.14.2 $\begin{Bmatrix} \text{DBBPUU} \\ \text{RBBPUU} \end{Bmatrix}$, 2.14.3 $\begin{Bmatrix} \text{DBBPUC} \\ \text{RBBPUC} \end{Bmatrix}$, 2.14.1 $\begin{Bmatrix} \text{DBBPSL} \\ \text{RBBPSL} \end{Bmatrix}$ のいずれかで行う.

(b) 配列 A には, 上三角行列 $L^T$ が対称バンド型で格納されていなければならない. 下三角行列 $L$ は $L^T$ より算出されるので, 配列 A には格納されていなくてよい (2.14.1 図 2−14 参照).

(c) 行列 $A$ の行列式の値は, 次の式で与えられる.
$det(A) = \mathrm{DET}(1) \times 10^{\mathrm{DET}(2)}$
このき, $1.0 \le |\mathrm{DET}(1)| < 10.0$ となるようにスケーリングされている.

(d) 正値対称バンド行列の逆行列は一般には対称な密行列であるため, このサブルーチンでは求められない.

## 2.14.6 DBBPLX, RBBPLX
## 連立 1 次方程式の解の改良 (正値対称バンド行列)

(1) **機 能**

正値対称バンド行列 $A$(対称バンド型) を係数行列とする連立 1 次方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ の解を反復法により改良する.

(2) **使用法**

倍精度サブルーチン:

CALL DBBPLX (A, LMA, N, MB, ALL, B, X, ITOL, NIT, W1, IERR)

単精度サブルーチン:

CALL RBBPLX (A, LMA, N, MB, ALL, B, X, ITOL, NIT, W1, IERR)

(3) **引 数**

D:倍精度実数型　Z:倍精度複素数型　I: { 32 ビット整数版では INTEGER(4) / 64 ビット整数版では INTEGER(8) }
R:単精度実数型　C:単精度複素数型

| 項番 | 引数名 | 型 | 大きさ | 入出力 | 内　　容 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | A | {D/R} | LMA, N | 入 力 | 係数行列 $A$(正値対称バンド行列, 対称バンド型) (付録 B 参照) |
| 2 | LMA | I | 1 | 入 力 | 配列 A, ALL の整合寸法 |
| 3 | N | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の次数 |
| 4 | MB | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ バンド幅 |
| 5 | ALL | {D/R} | LMA, N | 入 力 | $\mathrm{LL}^{\mathrm{T}}$ 分解後の係数行列 $A$(注意事項 (a) 参照) |
| 6 | B | {D/R} | N | 入 力 | 定数ベクトル$\boldsymbol{b}$ |
| 7 | X | {D/R} | N | 入 力 | 近似解$\boldsymbol{x}$ |
| | | | | 出 力 | 反復改良された解$\boldsymbol{x}$ |
| 8 | ITOL | I | 1 | 入 力 | 改良したい桁数 (注意事項 (b) 参照) |
| | | | | 出 力 | 改良された桁数の近似値 (注意事項 (c) 参照) |
| 9 | NIT | I | 1 | 入 力 | 最大反復回数 (注意事項 (d) 参照) |
| 10 | W1 | {D/R} | N | ワーク | 作業領域 |
| 11 | IERR | I | 1 | 出 力 | エラーインディケータ |

(4) **制限条件**

(a) $\mathrm{N} > 0$

(b) $0 \leq \mathrm{MB} \leq \mathrm{N} - 1$

(c) $\mathrm{MB} + 1 \leq \mathrm{LMA}$

(5) **エラーインディケータ**

| IERR の値 | 意　　　味 | 処　理　内　容 |
|---|---|---|
| 0 | 正常終了. | |
| 1000 | N = 1 であった. | 解は改良されない. |
| 3000 | 制限条件 (a), (b) または (c) を満足しなかった. | 処理を打ち切る. |
| $4000 + i$ | ALL の $i$ 番目の対角要素が 0.0 以下であった. | |
| 5000 | 最大反復回数以内で収束しなかった. | ITOL の出力値を計算し, 処理を打ち切る. |
| 6000 | 解を改良できなかった. | |

(6) **注意事項**

(a) このサブルーチンは, 2.14.1 $\left\{\begin{matrix}\text{DBBPSL}\\\text{RBBPSL}\end{matrix}\right\}$ または 2.14.4 $\left\{\begin{matrix}\text{DBBPLS}\\\text{RBBPLS}\end{matrix}\right\}$ によって得られた解を, さらに改良するものである. 従って, 入力として 2.14.1 $\left\{\begin{matrix}\text{DBBPSL}\\\text{RBBPSL}\end{matrix}\right\}$, 2.14.2 $\left\{\begin{matrix}\text{DBBPUU}\\\text{RBBPUU}\end{matrix}\right\}$ または 2.14.3 $\left\{\begin{matrix}\text{DBBPUC}\\\text{RBBPUC}\end{matrix}\right\}$ によって分解された係数行列 $A$ を与えなければならない.

(b) 解の改良は, 解の上位 ITOL 桁が修正されなくなるまで反復される. ただし, 以下の条件を満たす場合は, 解の修正が下位 1 ビット以下になるまで反復される.
ITOL $\leq 0$ または ITOL $\geq -$ LOG10 $(2 \times \varepsilon)$ ($\varepsilon$ : 誤差判定のための単位)

(c) 反復回数以内で, 要求された桁数が収束しなかった場合, 修正されなくなった桁数の近似値が ITOL に返される.

(d) NIT の入力値が 0 以下の場合, 既定値として 40 がとられる.

## 2.15 実 3 重対角行列 (ベクトル型)

### 2.15.1 DBTDSL, RBTDSL<br>連立 1 次方程式 (実 3 重対角行列)

(1) **機 能**

実 3 重対角行列 $A$(ベクトル型) を係数行列とする連立 1 次方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ をガウス法を用いて解く.

(2) **使用法**

倍精度サブルーチン:

CALL DBTDSL (SDL, D, SDU, N, B, IERR)

単精度サブルーチン:

CALL RBTDSL (SDL, D, SDU, N, B, IERR)

(3) **引 数**

D:倍精度実数型　Z:倍精度複素数型　I: $\left\{\begin{array}{l}\text{32 ビット整数版では INTEGER(4)}\\ \text{64 ビット整数版では INTEGER(8)}\end{array}\right\}$
R:単精度実数型　C:単精度複素数型

| 項番 | 引数名 | 型 | 大きさ | 入出力 | 内容 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | SDL | $\left\{\begin{matrix}D\\R\end{matrix}\right\}$ | N | 入 力 | 係数行列 $A$(実 3 重対角行列, ベクトル型) (付録 B 参照) の下副対角成分 |
| | | | | 出 力 | 入力時の内容は保存されない. |
| 2 | D | $\left\{\begin{matrix}D\\R\end{matrix}\right\}$ | N | 入 力 | 係数行列 $A$(実 3 重対角行列, ベクトル型) (付録 B 参照) の対角成分 |
| | | | | 出 力 | 入力時の内容は保存されない. |
| 3 | SDU | $\left\{\begin{matrix}D\\R\end{matrix}\right\}$ | N | 入 力 | 係数行列 $A$(実 3 重対角行列, ベクトル型) (付録 B 参照) の上副対角成分 |
| | | | | 出 力 | 入力時の内容は保存されない. |
| 4 | N | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の次数 |
| 5 | B | $\left\{\begin{matrix}D\\R\end{matrix}\right\}$ | N | 入 力 | 定数ベクトル$\boldsymbol{b}$ |
| | | | | 出 力 | 解$\boldsymbol{x}$ |
| 6 | IERR | I | 1 | 出 力 | エラーインディケータ |

(4) **制限条件**

(a) N > 0

(5) **エラーインディケータ**

| IERR の値 | 意　　味 | 処 理 内 容 |
|---|---|---|
| 0 | 正常終了. | |
| 1000 | N=1 であった. | B(1) ← B(1)/D(1) とする. |
| 3000 | 制限条件 (a) を満足しなかった. | 処理を打ち切る. |
| $4000 + i$ | $i$ 段目の処理で, ピボットが 0.0 となった. $A$ は特異に近い. | |

(6) **注意事項**

(a) このサブルーチンでは, 部分軸選択 (partial pivoting) を行っている.

(7) **使用例**

(a) 問 題

$$\begin{bmatrix} 2 & 3 & 0 & 0 \\ 1 & 2 & 3 & 0 \\ 0 & 1 & 2 & 3 \\ 0 & 0 & 1 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 8 \\ 14 \\ 20 \\ 11 \end{bmatrix}$$ を解く.

(b) 入力データ

下副対角成分 SDL, 対角成分 D, 上副対角成分 SDU, $\mathrm{N} = 4$, 定数ベクトル$\boldsymbol{b}$

(c) 主プログラム

```
      PROGRAM BBTDSL
! *** EXAMPLE OF DBTDSL ***
      IMPLICIT REAL(8) (A-H,O-Z)
      PARAMETER (NN = 10)
      DIMENSION SDL(NN),D(NN),SDU(NN),B(NN)
!
      READ (5,*) N
      WRITE (6,1000) N
      READ (5,*) (SDL(I),I=2,N),(D(I),I=1,N),(SDU(I),I=1,N-1)
      WRITE (6,1110) (SDL(I),I=2,N)
      WRITE (6,1100) (D(I),I=1,N)
      WRITE (6,1120) (SDU(I),I=1,N-1)
      READ (5,*) (B(I),I=1,N)
      WRITE (6,1200) (B(I),I=1,N)
      WRITE (6,1300)
      CALL DBTDSL (SDL,D,SDU,N,B,IERR)
      WRITE (6,1400) IERR
      IF (IERR .GE. 3000) STOP
      WRITE (6,1500) (I,B(I),I=1,N)
      STOP
!
 1000 FORMAT(' ',/,/,&
             ' ***  DBTDSL  ***',/,&
             2X,'**  INPUT  **',/,&
             6X,'N =',I3,/,&
             6X,'COEFFICIENT MATRIX')
 1100 FORMAT(7X,4(G11.4))
 1110 FORMAT(7X,'           ',3(G11.4))
 1120 FORMAT(7X,3(G11.4),'           ')
 1200 FORMAT(6X,'CONSTANT VECTOR',/,(7X,F10.4))
 1300 FORMAT(2X,'**  OUTPUT  **')
 1400 FORMAT(6X,'IERR =',I5)
 1500 FORMAT(6X,'SOLUTION',/,(8X,'X(',I2,') =',D18.10))
      END
```

(d) 出力結果

```
***  DBTDSL  ***
 **  INPUT  **
     N =  4
     COEFFICIENT MATRIX
                  1.000      1.000      1.000
        2.000      2.000      2.000      2.000
        3.000      3.000      3.000
     CONSTANT VECTOR
         8.0000
        14.0000
        20.0000
        11.0000
 **  OUTPUT  **
     IERR =    0
     SOLUTION
       X( 1) =  0.1000000000D+01
       X( 2) =  0.2000000000D+01
       X( 3) =  0.3000000000D+01
       X( 4) =  0.4000000000D+01
```

## 2.15.2 DBTPSL, RBTPSL<br>連立 1 次方程式 (正値対称 3 重対角行列)

(1) **機 能**

正値対称 3 重対角行列 $A$(ベクトル型) を係数行列とする連立 1 次方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ をガウス法を用いて解く.

(2) **使用法**

倍精度サブルーチン:

CALL DBTPSL (D, SD, N, B, IERR)

単精度サブルーチン:

CALL RBTPSL (D, SD, N, B, IERR)

(3) **引 数**

D:倍精度実数型　Z:倍精度複素数型
R:単精度実数型　C:単精度複素数型
I: {32 ビット整数版では INTEGER(4) / 64 ビット整数版では INTEGER(8)}

| 項番 | 引数名 | 型 | 大きさ | 入出力 | 内　容 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | D | {D/R} | N | 入 力 | 係数行列 $A$(正値対称 3 重対角行列, ベクトル型) (付録 B 参照) の対角成分 |
| | | | | 出 力 | 入力時の内容は保存されない. |
| 2 | SD | {D/R} | N | 入 力 | 係数行列 $A$(正値対称 3 重対角行列, ベクトル型) (付録 B 参照) の副対角成分 |
| | | | | 出 力 | 入力時の内容は保存されない. |
| 3 | N | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の次数 |
| 4 | B | {D/R} | N | 入 力 | 定数ベクトル$\boldsymbol{b}$ |
| | | | | 出 力 | 解$\boldsymbol{x}$ |
| 5 | IERR | I | 1 | 出 力 | エラーインディケータ |

(4) **制限条件**

(a) N > 0

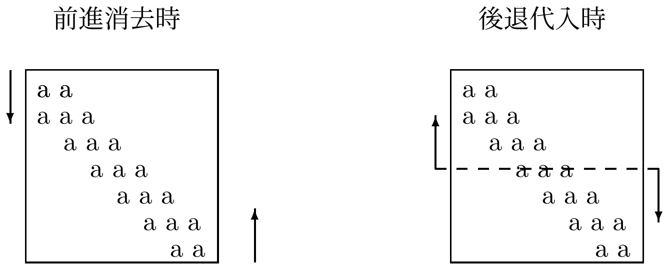
(5) **エラーインディケータ**

| IERR の値 | 意　味 | 処 理 内 容 |
|---|---|---|
| 0 | 正常終了. | |
| 1000 | N=1 であった. | B(1) ← B(1)/D(1) とする. |
| 3000 | 制限条件 (a) を満足しなかった. | 処理を打ち切る. |
| 4000 | 処理途中で, 対角成分が 0.0 となった. $A$ は特異に近い. | |

## (6) **注意事項**

(a) このサブルーチンでは, ガウスの消去法を, 行列 $A$ の対角の両端より同時に行っている. 従って, 前進消去, 後退代入は共に対角の中央で折り返して行われる.

図 2−15　正値対称 3 重対角行列に対する操作




## (7) **使用例**

(a) 問 題

$$\begin{bmatrix} -2 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & -2 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & -2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$ を解く.

(b) 入力データ

対角成分 D, 副対角成分 SD, N $= 4$, 定数ベクトル $\boldsymbol{b}$

(c) 主プログラム

```
      PROGRAM BBTPSL
! *** EXAMPLE OF DBTPSL ***
      IMPLICIT REAL(8) (A-H,O-Z)
      PARAMETER (NN = 10)
      DIMENSION D(NN),SD(NN),B(NN)
!
      READ (5,*) N
      WRITE (6,1000) N
      READ (5,*) (D(I),I=1,N),(SD(I),I=1,N-1)
      WRITE (6,1100) (D(I),I=1,N)
      WRITE (6,1110) (SD(I),I=1,N-1)
      READ (5,*) (B(I),I=1,N)
      WRITE (6,1200) (B(I),I=1,N)
      WRITE (6,1300)
      CALL DBTPSL (D,SD,N,B,IERR)
      WRITE (6,1400) IERR
      IF (IERR .GE. 3000) STOP
      WRITE (6,1500) (I,B(I),I=1,N)
      STOP
!
 1000 FORMAT(' ',/,/,&
             ' ***  DBTPSL  ***',/,&
             2X,'**  INPUT  **',/,&
             6X,'N =',I3,/,&
             6X,'COEFFICIENT MATRIX')
 1100 FORMAT(7X,4(G11.4))
 1110 FORMAT(7X,3(G11.4),'           ')
 1200 FORMAT(6X,'CONSTANT VECTOR',/,(7X,F10.4))
 1300 FORMAT(2X,'**  OUTPUT  **')
 1400 FORMAT(6X,'IERR =',I5)
 1500 FORMAT(6X,'SOLUTION',/,(8X,'X(',I2,') =',D18.10))
      END
```

(d) 出力結果

```
***  DBTPSL  ***
 **  INPUT  **
     N =  4
     COEFFICIENT MATRIX
       -2.000     -2.000     -2.000     -2.000
        1.000      1.000      1.000
     CONSTANT VECTOR
         -1.0000
          0.0000
          0.0000
          0.0000
```

```
**  OUTPUT  **
    IERR =    0
    SOLUTION
      X( 1) =  0.8000000000D+00
      X( 2) =  0.6000000000D+00
      X( 3) =  0.4000000000D+00
      X( 4) =  0.2000000000D+00
```

## 2.16 実 3 重対角行列 (ベクトル型)

### 2.16.1 WBTDSL 連立 1 次方程式 (実 3 重対角行列)

(1) **機 能**

実 3 重対角行列 $A$(ベクトル型) を係数行列とする連立 1 次方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ をサイクリック・リダクション法を用いて解く.

(2) **使用法**

倍精度サブルーチン:

CALL WBTDSL (SDL, D, SDU, N, B, IW, W1, IERR)

単精度サブルーチン:

なし

(3) **引 数**

D:倍精度実数型　Z:倍精度複素数型　I: { 32 ビット整数版では INTEGER(4) / 64 ビット整数版では INTEGER(8) }
R:単精度実数型　C:単精度複素数型

| 項番 | 引数名 | 型 | 大きさ | 入出力 | 内容 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | SDL | D | N | 入 力 | 係数行列 $A$(実 3 重対角行列, ベクトル型) (付録 B 参照) の下副対角成分 |
| | | | | 出 力 | 入力時の内容は保存されない. |
| 2 | D | D | N | 入 力 | 係数行列 $A$(実 3 重対角行列, ベクトル型) (付録 B 参照) の対角成分 |
| | | | | 出 力 | 入力時の内容は保存されない. |
| 3 | SDU | D | N | 入 力 | 係数行列 $A$(実 3 重対角行列, ベクトル型) (付録 B 参照) の上副対角成分 |
| | | | | 出 力 | 入力時の内容は保存されない. |
| 4 | N | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の次数 |
| 5 | B | D | N | 入 力 | 定数ベクトル$\boldsymbol{b}$ |
| | | | | 出 力 | 解ベクトル$\boldsymbol{x}$ |
| 6 | IW | I | 内容参照 | ワーク | 作業領域 (注意事項 (a) 参照) **大きさ:** $(3 \times \lfloor \log_2(\mathrm{N}) \rfloor + 1)$ |
| 7 | W1 | D | $4 \times \mathrm{N}$ | ワーク | 作業領域 |
| 8 | IERR | I | 1 | 出 力 | エラーインディケータ |

(4) **制限条件**

(a) $\mathrm{N} > 0$

(5) **エラーインディケータ**

| IERR の値 | 意　　　　　味 | 処　理　内　容 |
|---|---|---|
| 0 | 正常終了. | |
| 1000 | N = 1 であった. | B(1) ← B(1)/D(1) とする. |
| 3000 | 制限条件 (a) を満足しなかった. | 処理を打ち切る. |
| 4000 | $A$ は特異に近い. | |

(6) **注意事項**

(a) $\lfloor \log_2(\mathrm{N}) \rfloor$ は $\log_2(\mathrm{N})$ を超えない最大の整数を表す.

(b) このサブルーチンは, 倍精度のみサポートされる.

(7) **使用例**

(a) 問 題

$$\begin{bmatrix} 6 & 2 & 0 & 0 \\ 1 & 6 & 2 & 0 \\ 0 & 1 & 6 & 2 \\ 0 & 0 & 1 & 6 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} X_1 \\ X_2 \\ X_3 \\ X_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 10 \\ 19 \\ 28 \\ 27 \end{bmatrix}$$ を解く.

(b) 入力データ

下副対角成分 SDL, 対角成分 D, 上副対角成分 SDU, N = 4, 定数ベクトル $\boldsymbol{b}$

(c) 主プログラム

```
      PROGRAM EBTDSL
!     *** EXAMPLE OF WBTDSL ***
      IMPLICIT REAL(8) (A-H,O-Z)
      PARAMETER (NN = 10)
      DIMENSION SDL(NN),D(NN),SDU(NN),B(NN),DWK(4*NN),IW(10)
!
      READ (5,*) N
      WRITE (6,1000) N
      READ (5,*) (SDL(I),I=2,N),(D(I),I=1,N),(SDU(I),I=1,N-1)
      WRITE (6,1600) (SDL(I),I=2,N)
      WRITE (6,1100) (D(I),I=1,N)
      WRITE (6,1700) (SDU(I),I=1,N-1)
      READ (5,*) (B(I),I=1,N)
      WRITE (6,1200) (B(I),I=1,N)
      WRITE (6,1300)
      CALL WBTDSL (SDL,D,SDU,N,B,IW,DWK,IERR)
      WRITE (6,1400) IERR
      IF (IERR .GE. 3000) STOP
      WRITE (6,1500) (I,B(I),I=1,N)
      STOP
!
 1000 FORMAT (' ',/,/,' ***  WBTDSL  ***',/,2X,'**  INPUT  **',/,&
      6X,'N =',I3,/,6X,'COEFFICIENT MATRIX')
 1100 FORMAT (7X,4(G11.4))
 1200 FORMAT (6X,'CONSTANT VECTOR',/,(7X,F10.4))
 1300 FORMAT (2X,'**  OUTPUT  **')
 1400 FORMAT (6X,'IERR =',I5)
 1500 FORMAT (6X,'SOLUTION',/,(8X,'X(',I2,') =',D18.10))
 1600 FORMAT (18X,3(G11.4))
 1700 FORMAT (7X,3(G11.4),1X)
      END
```

(d) 出力結果

```
***  WBTDSL  ***
 **  INPUT  **
     N =  4
     COEFFICIENT MATRIX
                   1.000      1.000      1.000
        6.000      6.000      6.000      6.000
        2.000      2.000      2.000
     CONSTANT VECTOR
         10.0000
         19.0000
         28.0000
         27.0000
 **  OUTPUT  **
     IERR =    0
     SOLUTION
       X( 1) =  0.1000000000D+01
       X( 2) =  0.2000000000D+01
       X( 3) =  0.3000000000D+01
       X( 4) =  0.4000000000D+01
```

### 2.16.2 WBTDLS<br>連立 1 次方程式 (リダクション操作後の実 3 重対角行列)

(1) **機 能**

サイクリック・リダクション法でリダクション操作された実 3 重対角行列 $A$ (ベクトル型) を係数とする連立 1 次方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ を解く.

(2) **使用法**

倍精度サブルーチン:

CALL WBTDLS (SDL, D, SDU, N, B, IW, W1, IERR)

単精度サブルーチン:

なし

(3) **引 数**

D:倍精度実数型　Z:倍精度複素数型　I: { 32 ビット整数版では INTEGER(4) / 64 ビット整数版では INTEGER(8) }
R:単精度実数型　C:単精度複素数型

| 項番 | 引数名 | 型 | 大きさ | 入出力 | 内　容 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | SDL | D | N | 入 力 | リダクション操作後の係数行列 $A$(実 3 重対角行列, ベクトル型) (付録 B 参照) の下副対角成分 (注意事項 (a) 参照) |
| 2 | D | D | N | 入 力 | リダクション操作後の係数行列 $A$(実 3 重対角行列, ベクトル型) (付録 B 参照) の対角成分 (注意事項 (a) 参照) |
| 3 | SDU | D | N | 入 力 | リダクション操作後の係数行列 $A$(実 3 重対角行列, ベクトル型) (付録 B 参照) の上副対角成分 (注意事項 (a) 参照) |
| 4 | N | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の次数 |
| 5 | B | D | N | 入 力 | 定数ベクトル$\boldsymbol{b}$ |
| | | | | 出 力 | 解ベクトル$\boldsymbol{x}$ |
| 6 | IW | I | 内容参照 | 入 力 | リダクション操作の情報 (注意事項 (a), (b) 参照) **大きさ:** $(3 \times \lfloor \log_2(\mathrm{N}) \rfloor + 1)$ |
| 7 | W1 | D | $4 \times \mathrm{N}$ | 入 力 | リダクション操作の情報 (注意事項 (a) 参照) |
| 8 | IERR | I | 1 | 出 力 | エラーインディケータ |

(4) **制限条件**

(a) $\mathrm{N} > 0$

(5) **エラーインディケータ**

| IERR の値 | 意　　　　　味 | 処　理　内　容 |
|---|---|---|
| 0 | 正常終了. | |
| 1000 | N = 1 であった. | B(1) ← B(1))/D(1) とする. |
| 3000 | 制限条件 (a) を満足しなかった. | 処理を打ち切る. |
| 4000 | $A$ は特異に近い (N = 1 のときのみ) | |

(6) **注意事項**

(a) このサブルーチンは, 係数行列が同じで定数ベクトルの異なる複数の連立 1 次方程式を解く場合に利用できる. 最初, 2.16.1 WBTDSL を用いて係数行列のリダクション操作と求解を行った後に, このサブルーチンを用いて求解だけを繰り返し行えばよい. そのとき, 2.16.1 WBTDSL の SDL, D, SDU, IW, W1 の内容は, このサブルーチンの入力となるので保存しておかなくてはならない.

(b) $\lfloor \log_2(\mathrm{N}) \rfloor$ は $\log_2(\mathrm{N})$ を超えない最大の整数を表す.

(c) このサブルーチンは, 倍精度のみサポートされる.

(7) **使用例**

(a) 問 題

$$A = \begin{bmatrix} 6 & 2 & 0 & 0 \\ 1 & 6 & 2 & 0 \\ 0 & 1 & 6 & 2 \\ 0 & 0 & 1 & 6 \end{bmatrix}, \ \boldsymbol{b}_1 = \begin{bmatrix} 10 \\ 19 \\ 28 \\ 27 \end{bmatrix}, \ \boldsymbol{b}_2 = \begin{bmatrix} 30 \\ 26 \\ 17 \\ 8 \end{bmatrix}$$

として$\boldsymbol{x}$および$\boldsymbol{y}$についての連立 1 次方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}_1$, $A\boldsymbol{y} = \boldsymbol{b}_2$ を解く.

(b) 入力データ

下副対角成分 SDL, 対角成分 D, 上副対角成分 SDU, N = 4, 定数ベクトル $\boldsymbol{b}_1$, $\boldsymbol{b}_2$

(c) 主プログラム

```
      PROGRAM EBTDLS
!     *** EXAMPLE OF WBTDLS ***
      IMPLICIT REAL(8) (A-H,O-Z)
      PARAMETER (NN = 10)
      DIMENSION SDL(NN),D(NN),SDU(NN),B1(NN),B2(NN),DWK(4*NN),IW(10)
!
      READ (5,*) N
      WRITE (6,1000) N
      READ (5,*) (SDL(I),I=2,N),(D(I),I=1,N),(SDU(I),I=1,N-1)
      WRITE (6,1700) (SDL(I),I=2,N)
      WRITE (6,1100) (D(I),I=1,N)
      WRITE (6,1800) (SDU(I),I=1,N-1)
      READ (5,*) (B1(I),I=1,N)
      READ (5,*) (B2(I),I=1,N)
      WRITE (6,1200) (B1(I),B2(I),I=1,N)
      WRITE (6,1300)
      CALL WBTDSL (SDL,D,SDU,N,B1,IW,DWK,KERR)
      CALL WBTDLS (SDL,D,SDU,N,B2,IW,DWK,IERR)
      WRITE (6,1400) IERR
      IF (IERR .GE. 3000) STOP
      WRITE (6,1500) (I,B1(I),I=1,N)
      WRITE (6,1600) (I,B2(I),I=1,N)
      STOP
!
 1000 FORMAT (' ',/,/,' ***  WBTDLS  ***',/,2X,'**  INPUT  **',/,&
      6X,'N =',I3,/,6X,'COEFFICIENT MATRIX')
 1100 FORMAT (7X,4(G11.4))
 1200 FORMAT (6X,'CONSTANT VECTOR',/,(7X,F10.4,4X,F10.4))
 1300 FORMAT (2X,'**  OUTPUT  **')
 1400 FORMAT (6X,'IERR =',I5)
 1500 FORMAT (6X,'SOLUTION X',/,(8X,'X(',I2,') =',D18.10))
 1600 FORMAT (6X,'SOLUTION Y',/,(8X,'Y(',I2,') =',D18.10))
 1700 FORMAT (18X,3(G11.4))
 1800 FORMAT (7X,3(G11.4),1X)
      END
```

(d) 出力結果

```
*** WBTDLS ***
 ** INPUT **
    N =  4
    COEFFICIENT MATRIX
                  1.000      1.000      1.000
       6.000      6.000      6.000      6.000
       2.000      2.000      2.000
    CONSTANT VECTOR
        10.0000       30.0000
        19.0000       26.0000
        28.0000       17.0000
        27.0000        8.0000
 ** OUTPUT **
    IERR =    0
    SOLUTION X
      X( 1) =  0.1000000000D+01
      X( 2) =  0.2000000000D+01
      X( 3) =  0.3000000000D+01
      X( 4) =  0.4000000000D+01
    SOLUTION Y
      Y( 1) =  0.4000000000D+01
      Y( 2) =  0.3000000000D+01
      Y( 3) =  0.2000000000D+01
      Y( 4) =  0.1000000000D+01
```

## 2.17 定係数型実 3 重対角行列 (スカラ型)

### 2.17.1 WBTCSL<br>連立 1 次方程式 (定係数型実 3 重対角行列)

(1) **機 能**

定係数型実 3 重対角行列 $A$(スカラ型) を係数行列とする連立 1 次方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ をサイクリック・リダクション法を用いて解く.

(2) **使用法**

倍精度サブルーチン:

CALL WBTCSL ( D, SD, N, B, ISW, IW, W1, IERR)

単精度サブルーチン:

なし

(3) **引 数**

D:倍精度実数型　Z:倍精度複素数型　I: { 32 ビット整数版では INTEGER(4) }
R:単精度実数型　C:単精度複素数型　　{ 64 ビット整数版では INTEGER(8) }

| 項番 | 引数名 | 型 | 大きさ | 入出力 | 内　容 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | D | D | 1 | 入 力 | 係数行列 $A$ (定係数型実 3 重対角行列, スカラ型) (注意事項 (a) 参照) の対角成分 |
| | | | | 出 力 | 入力時の内容は保存されない. |
| 2 | SD | D | 1 | 入 力 | 係数行列 $A$ (定係数型実 3 重対角行列, スカラ型) (注意事項 (a) 参照) の副対角成分 |
| | | | | 出 力 | 入力時の内容は保存されない. |
| 3 | N | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の次数 |
| 4 | B | D | N | 入 力 | 定数ベクトル$\boldsymbol{b}$ |
| | | | | 出 力 | 解ベクトル$\boldsymbol{x}$ |
| 5 | ISW | I | 1 | 入 力 | 係数行列 $A$ の型を指定する (注意事項 (a) 参照) ISW=1, 2, 3 or 4 |
| 6 | IW | I | 内容参照 | ワーク | 作業領域 (注意事項 (b) 参照) **大きさ:** $(3 \times \lfloor \log_2(\mathrm{N}) \rfloor + 1)$ |
| 7 | W1 | D | 内容参照 | ワーク | 作業領域 **大きさ:** $(\mathrm{N} + 3 \times \lfloor \log_2(\mathrm{N}) \rfloor + 2)$ |
| 8 | IERR | I | 1 | 出 力 | エラーインディケータ |

(4) **制限条件**

(a) $\mathrm{N} > 0$

(b) $\mathrm{ISW} \in \{1, 2, 3, 4\}$

(5) **エラーインディケータ**

| IERR の値 | 意　　　　　味 | 処　理　内　容 |
|---|---|---|
| 0 | 正常終了. | |
| 1000 | N = 1 であった | B(1) ← B(1)/D(1) とする. |
| 3000 | 制限条件 (a), (b) を満足しなかった. | 処理を打ち切る. |
| 4000 | $A$ は特異に近い. | |

(6) **注意事項**

(a) 係数行列 $A$ は ISW = 1, 2, 3 または 4 のような定係数型実 3 重対角行列である.

・ISW=1 の場合

$$\begin{bmatrix} \mathrm{D} & \mathrm{SD} & & & & 0 \\ \mathrm{SD} & \mathrm{D} & \mathrm{SD} & & & \\ & \mathrm{SD} & \mathrm{D} & \mathrm{SD} & & \\ & & \cdot & \cdot & \cdot & \\ & & & \cdot & \cdot & \cdot \\ & 0 & & \cdot & \mathrm{D} & \mathrm{SD} \\ & & & & \mathrm{SD} & \mathrm{D} \end{bmatrix}, \mathrm{D} \neq 0, \mathrm{SD} \neq 0$$

・ISW=2 の場合

$$\begin{bmatrix} \mathrm{D} & \mathrm{SD} & & & & 0 \\ \mathrm{SD} & \mathrm{D} & \mathrm{SD} & & & \\ & \mathrm{SD} & \mathrm{D} & \mathrm{SD} & & \\ & & \cdot & \cdot & \cdot & \\ & & & \cdot & \cdot & \cdot \\ & 0 & & \cdot & \mathrm{D} & \mathrm{SD} \\ & & & & 2\times\mathrm{SD} & \mathrm{D} \end{bmatrix}, \mathrm{D} \neq 0, \mathrm{SD} \neq 0$$

・ISW=3 の場合

$$\begin{bmatrix} \mathrm{D} & 2\times\mathrm{SD} & & & & 0 \\ \mathrm{SD} & \mathrm{D} & \mathrm{SD} & & & \\ & \mathrm{SD} & \mathrm{D} & \mathrm{SD} & & \\ & & \cdot & \cdot & \cdot & \\ & & & \cdot & \cdot & \cdot \\ & 0 & & \cdot & \mathrm{D} & \mathrm{SD} \\ & & & & \mathrm{SD} & \mathrm{D} \end{bmatrix}, \mathrm{D} \neq 0, \mathrm{SD} \neq 0$$

・ISW=4 の場合

$$\begin{bmatrix} \mathrm{D} & 2\times\mathrm{SD} & & & & 0 \\ \mathrm{SD} & \mathrm{D} & \mathrm{SD} & & & \\ & \mathrm{SD} & \mathrm{D} & \mathrm{SD} & & \\ & & \cdot & \cdot & \cdot & \\ & & & \cdot & \cdot & \cdot \\ & 0 & & \cdot & \mathrm{D} & \mathrm{SD} \\ & & & & 2\times\mathrm{SD} & \mathrm{D} \end{bmatrix}, \mathrm{D} \neq 0, \mathrm{SD} \neq 0$$

上記のような係数行列は, ディリクレ型境界値問題またはノイマン型境界値問題を離散化するときに現れる.

(b) $\lfloor \log_2(\mathrm{N}) \rfloor$ は $\log_2(\mathrm{N})$ を超えない最大の整数を表す.

(c) このサブルーチンは, 倍精度のみサポートされる.

(7) **使用例**

(a) 問 題

$$\begin{bmatrix} 6 & 2 & 0 & 0 \\ 2 & 6 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & 6 & 2 \\ 0 & 0 & 2 & 6 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} X_1 \\ X_2 \\ X_3 \\ X_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 8 \\ 10 \\ 10 \\ 8 \end{bmatrix}$$ を解く.

(b) 入力データ

対角成分 D, 副対角成分 SD, N = 4, ISW = 1, 定数ベクトル $\boldsymbol{b}$

(c) 主プログラム

```
      PROGRAM EBTCSL
!     *** EXAMPLE OF WBTCSL ***
      IMPLICIT REAL(8) (A-H,O-Z)
      PARAMETER (NN = 10)
      DIMENSION SDL(NN),D(NN),SDU(NN),B(NN),DWK(21),IW(10)
!
      READ (5,*) N,ISW
      WRITE (6,1000) N,ISW
      READ (5,*) (SDL(I),I=2,N),(D(I),I=1,N),(SDU(I),I=1,N-1)
      WRITE (6,1600) (SDL(I),I=2,N)
      WRITE (6,1100) (D(I),I=1,N)
      WRITE (6,1700) (SDU(I),I=1,N-1)
      READ (5,*) (B(I),I=1,N)
      WRITE (6,1200) (B(I),I=1,N)
      WRITE (6,1300)
      DD = D(1)
      SD = SDL(2)
      CALL WBTCSL (DD,SD,N,B,ISW,IW,DWK,IERR)
      WRITE (6,1400) IERR
      IF (IERR .GE. 2000) STOP
      WRITE (6,1500) (I,B(I),I=1,N)
      STOP
!
 1000 FORMAT (' ',/,/,' ***  WBTCSL  ***',/,2X,'**  INPUT  **',/,&
      6X,'N =',I3,/,6X,'ISW =',I3,/,6X,'COEFFICIENT MATRIX')
 1100 FORMAT (7X,4(G11.4))
 1200 FORMAT (6X,'CONSTANT VECTOR',/,(7X,F10.4))
 1300 FORMAT (2X,'**  OUTPUT  **')
 1400 FORMAT (6X,'IERR =',I5)
 1500 FORMAT (6X,'SOLUTION',/,(8X,'X(',I2,') =',D18.10))
 1600 FORMAT (18X,3(G11.4))
 1700 FORMAT (7X,3(G11.4),1X)
      END
```

(d) 出力結果

```
***  WBTCSL  ***
 **  INPUT  **
     N =  4
     ISW =  1
     COEFFICIENT MATRIX
                  2.000      2.000      2.000
        6.000      6.000      6.000      6.000
        2.000      2.000      2.000
     CONSTANT VECTOR
         8.0000
        10.0000
        10.0000
         8.0000
 **  OUTPUT  **
     IERR =    0
     SOLUTION
       X( 1) =  0.1000000000D+01
       X( 2) =  0.1000000000D+01
       X( 3) =  0.1000000000D+01
       X( 4) =  0.1000000000D+01
```

## 2.17.2 WBTCLS
## 連立 1 次方程式 (リダクション操作後の定係数型実 3 重対角行列)

(1) **機 能**

サイクリック・リダクション法でリダクション操作された定係数型実 3 重対角行列 $A$(スカラ型) を係数とする連立 1 次方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ を解く.

(2) **使用法**

倍精度サブルーチン:

CALL WBTCLS (D, SD, N, B, ISW, IW, W1, IERR)

単精度サブルーチン:

なし

(3) **引 数**

D:倍精度実数型　Z:倍精度複素数型
R:単精度実数型　C:単精度複素数型
I: { 32 ビット整数版では INTEGER(4) / 64 ビット整数版では INTEGER(8) }

| 項番 | 引数名 | 型 | 大きさ | 入出力 | 内　容 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | D | D | 1 | 入 力 | リダクション操作後の係数行列 $A$ (定係数型実 3 重対角行列, スカラ型) の対角成分 (注意事項 (a), (b) 参照) |
| 2 | SD | D | 1 | 入 力 | リダクション操作後の係数行列 $A$ (定係数型実 3 重対角行列, スカラ型) の副対角成分 (注意事項 (a), (b) 参照) |
| 3 | N | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の次数 |
| 4 | B | D | N | 入 力 | 定数ベクトル $\boldsymbol{b}$ |
| | | | | 出 力 | 解ベクトル $\boldsymbol{x}$ |
| 5 | ISW | I | 1 | 入 力 | 係数行列 $A$ の型を指定する (注意事項 (b) 参照) ISW=1, 2, 3 or 4 |
| 6 | IW | I | 内容参照 | 入 力 | リダクション操作の情報 (注意事項 (a), (c) 参照) **大きさ:** $(3 \times \lfloor \log_2(\mathrm{N}) \rfloor + 1)$ |
| 7 | W1 | D | 内容参照 | 入 力 | リダクション操作の情報 (注意事項 (a), (d) 参照) **大きさ:** $(\mathrm{N} + 3 \times \lfloor \log_2(\mathrm{N}) \rfloor + 2)$ |
| 8 | IERR | I | 1 | 出 力 | エラーインディケータ |

(4) **制限条件**

(a) $\mathrm{N} > 0$

(b) $\mathrm{ISW} \in \{1, 2, 3, 4\}$

## (5) エラーインディケータ

| IERR の値 | 意　　　　味 | 処　理　内　容 |
|---|---|---|
| 0 | 正常終了. | |
| 1000 | N = 1 であった. | B(1) ← B(1)/D(1) とする. |
| 3000 | 制限条件 (a), (b) を満足しなかった. | 処理を打ち切る. |
| 4000 | $A$ は特異に近い (N = 1 のときのみ) | |

## (6) 注意事項

(a) このサブルーチンは, 係数行列が同じで定数ベクトルの異なる複数の連立1次方程式を解く場合に利用できる. 最初, 2.17.1 WBTCSL を用いて係数行列のリダクション操作と求解を行った後に, このサブルーチンを用いて求解だけを繰り返し行えばよい. そのとき, 2.17.1 WBTCSL の D, SD, IW, W1 の内容は, このサブルーチンの入力となるので保存しておかなくてはならない.

(b) 係数行列 $A$ は ISW = 1, 2, 3 または 4 の場合, 次のような定係数型実 3 重対角行列である.

・ISW=1 の場合

$$\begin{bmatrix} \mathrm{D} & \mathrm{SD} & & & & 0 \\ \mathrm{SD} & \mathrm{D} & \mathrm{SD} & & & \\ & \mathrm{SD} & \mathrm{D} & \mathrm{SD} & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & \ddots & \mathrm{D} & \mathrm{SD} \\ 0 & & & & \mathrm{SD} & \mathrm{D} \end{bmatrix}, \mathrm{D} \neq 0, \mathrm{SD} \neq 0$$

・ISW=2 の場合

$$\begin{bmatrix} \mathrm{D} & \mathrm{SD} & & & & 0 \\ \mathrm{SD} & \mathrm{D} & \mathrm{SD} & & & \\ & \mathrm{SD} & \mathrm{D} & \mathrm{SD} & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & \ddots & \mathrm{D} & \mathrm{SD} \\ 0 & & & & 2 \times \mathrm{SD} & \mathrm{D} \end{bmatrix}, \mathrm{D} \neq 0, \mathrm{SD} \neq 0$$

・ISW=3 の場合

$$\begin{bmatrix} \mathrm{D} & 2 \times \mathrm{SD} & & & & 0 \\ \mathrm{SD} & \mathrm{D} & \mathrm{SD} & & & \\ & \mathrm{SD} & \mathrm{D} & \mathrm{SD} & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & \ddots & \mathrm{D} & \mathrm{SD} \\ 0 & & & & \mathrm{SD} & \mathrm{D} \end{bmatrix}, \mathrm{D} \neq 0, \mathrm{SD} \neq 0$$

・ISW=4 の場合

$$\begin{bmatrix} \mathrm{D} & 2\times\mathrm{SD} & & & & 0 \\ \mathrm{SD} & \mathrm{D} & \mathrm{SD} & & & \\ & \mathrm{SD} & \mathrm{D} & \mathrm{SD} & & \\ & & \cdot & \cdot & \cdot & \\ & & & \cdot & \cdot & \cdot \\ & 0 & & \cdot & \mathrm{D} & \mathrm{SD} \\ & & & & 2\times\mathrm{SD} & \mathrm{D} \end{bmatrix}, \mathrm{D}\neq 0, \mathrm{SD}\neq 0$$

上記のような係数行列は, ディリクレ型境界値問題またはノイマン型境界値問題を離散化するときに現れる.

(c) $\lfloor \log_2(\mathrm{N}) \rfloor$ は $\log_2(\mathrm{N})$ を超えない最大の整数を表す.

(d) このサブルーチンは, 倍精度のみサポートされる.

(7) **使用例**

(a) 問 題

$$A = \begin{bmatrix} 6 & 2 & 0 & 0 \\ 2 & 6 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & 6 & 2 \\ 0 & 0 & 2 & 6 \end{bmatrix}, \ \boldsymbol{b}_1 = \begin{bmatrix} 8 \\ 10 \\ 10 \\ 8 \end{bmatrix}, \ \boldsymbol{b}_2 = \begin{bmatrix} 10 \\ 20 \\ 30 \\ 30 \end{bmatrix}$$

として$\boldsymbol{x}$および$\boldsymbol{y}$についての連立 1 次方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}_1$, $A\boldsymbol{y} = \boldsymbol{b}_2$ を解く.

(b) 入力データ

対角成分 D, 副対角成分 SD, N = 4, ISW = 1, 定数ベクトル $\boldsymbol{b}_1$, $\boldsymbol{b}_2$

(c) 主プログラム

```
      PROGRAM EBTCLS
!     *** EXAMPLE OF WBTCLS ***
      IMPLICIT REAL(8) (A-H,O-Z)
      PARAMETER (NN = 10)
      DIMENSION B1(NN),B2(NN),DWK(21),IW(10)
!
      READ (5,*) N,ISW
      WRITE (6,1000) N,ISW
      READ (5,*) DD,SD
      WRITE (6,1100) DD
      WRITE (6,1100) SD
      READ (5,*) (B1(I),I=1,N)
      READ (5,*) (B2(I),I=1,N)
      WRITE (6,1200) (B1(I),B2(I),I=1,N)
      WRITE (6,1300)
      CALL WBTCSL (DD,SD,N,B1,ISW,IW,DWK,KERR)
      CALL WBTCLS (DD,SD,N,B2,ISW,IW,DWK,IERR)
      WRITE (6,1400) IERR
      IF (IERR .GE. 2000) STOP
      WRITE (6,1500) (I,B1(I),I=1,N)
      WRITE (6,1600) (I,B2(I),I=1,N)
      STOP
!
 1000 FORMAT (' ',/,/,' ***  WBTCLS  ***',/,2X,'**  INPUT  **',/,&
      6X,'N =',I3,/,6X,'ISW =',I3,/,6X,'COEFFICIENT MATRIX')
 1100 FORMAT (16X,G11.4)
 1200 FORMAT (6X,'CONSTANT VECTOR',/,(7X,F10.4,4X,F10.4))
 1300 FORMAT (2X,'**  OUTPUT  **')
 1400 FORMAT (6X,'IERR =',I5)
 1500 FORMAT (6X,'SOLUTION X',/,(8X,'X(',I2,') =',D18.10))
 1600 FORMAT (6X,'SOLUTION Y',/,(8X,'Y(',I2,') =',D18.10))
      END
```

(d) 出力結果

```
***  WBTCLS  ***
 **  INPUT  **
     N =  4
     ISW =  1
     COEFFICIENT MATRIX
                 6.000
                 2.000
     CONSTANT VECTOR
```

```
          8.0000        10.0000
         10.0000        20.0000
         10.0000        30.0000
          8.0000        30.0000
 **  OUTPUT  **
     IERR =    0
     SOLUTION X
       X( 1) =  0.1000000000D+01
       X( 2) =  0.1000000000D+01
       X( 3) =  0.1000000000D+01
       X( 4) =  0.1000000000D+01
     SOLUTION Y
       Y( 1) =  0.1000000000D+01
       Y( 2) =  0.2000000000D+01
       Y( 3) =  0.3000000000D+01
       Y( 4) =  0.4000000000D+01
```

## 2.18 Vandermonde 行列と Toeplitz 行列

### 2.18.1 DBTOSL, RBTOSL
### 連立 1 次方程式 (Toeplitz 行列)

(1) **機 能**

$2 \times n - 1$ 個の要素 $r_k$ $(k = -n+1, -n+2, \cdots, n-1)$ で構成される $n$ 次の Toeplitz 行列 $R$

$$R = \begin{bmatrix} r_0 & r_{-1} & r_{-2} & \cdots & r_{-n+2} & r_{-n+1} \\ r_1 & r_0 & r_{-1} & \cdots & r_{-n+3} & r_{-n+2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & & \ddots & \vdots & \vdots \\ r_{n-2} & r_{n-3} & r_{n-4} & \cdots & r_0 & r_{-1} \\ r_{n-1} & r_{n-2} & r_{n-3} & \cdots & r_1 & r_0 \end{bmatrix}$$

を係数行列とする連立 1 次方程式 $R\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$:

$$\sum_{j=1}^{n} r_{i-j} x_j = b_i \quad (i = 1, \cdots, n)$$

または $R^T$ を係数行列とする連立 1 次方程式 $R^T\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$:

$$\sum_{j=1}^{n} r_{j-i} x_j = b_i \quad (i = 1, \cdots, n)$$

を解く.

(2) **使用法**

倍精度サブルーチン:

CALL DBTOSL (R, N, B, X, W, ISW, IERR)

単精度サブルーチン:

CALL RBTOSL (R, N, B, X, W, ISW, IERR)

### (3) 引 数

D:倍精度実数型　Z:倍精度複素数型　I: $\begin{cases} \text{32 ビット整数版では INTEGER(4)} \\ \text{64 ビット整数版では INTEGER(8)} \end{cases}$
R:単精度実数型　C:単精度複素数型

| 項番 | 引数名 | 型 | 大きさ | 入出力 | 内　　容 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | R | $\begin{Bmatrix} \mathrm{D} \\ \mathrm{R} \end{Bmatrix}$ | $2 \times \mathrm{N} - 1$ | 入 力 | Toeplitz 行列 $R$ の構成要素 $r_k$ $(k = -n+1, -n+2, \cdots, n-1)$ |
| 2 | N | I | 1 | 入 力 | 行列 $R$ の次数 $n$ |
| 3 | B | $\begin{Bmatrix} \mathrm{D} \\ \mathrm{R} \end{Bmatrix}$ | N | 入 力 | 定数ベクトル$\boldsymbol{b}$ |
| 4 | X | $\begin{Bmatrix} \mathrm{D} \\ \mathrm{R} \end{Bmatrix}$ | N | 出 力 | 解ベクトル$\boldsymbol{x}$ |
| 5 | W | $\begin{Bmatrix} \mathrm{D} \\ \mathrm{R} \end{Bmatrix}$ | $2 \times \mathrm{N}$ | ワーク | 作業領域 |
| 6 | ISW | I | 1 | 入 力 | 処理スイッチ<br>1: $R\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ を解く<br>2: $R^T\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ を解く |
| 7 | IERR | I | 1 | 出 力 | エラーインディケータ |

### (4) 制限条件

(a) $\mathrm{ISW} \in \{1, 2\}$

(b) $\mathrm{N} > 0$

(c) $\mathrm{R(N)} \neq 0$

### (5) エラーインディケータ

| IERR の値 | 意　　味 | 処 理 内 容 |
|---|---|---|
| 0 | 正常終了. | |
| 1000 | $\mathrm{N} = 1$ であった. | $\mathrm{X(1)} \leftarrow \mathrm{B(1)/R(N)}$ とする. |
| 3000 | 制限条件 (a) を満足しなかった. | 処理を打ち切る. |
| 3010 | 制限条件 (b) を満足しなかった. | |
| 3020 | 制限条件 (c) を満足しなかった. | |
| 4000 | 除数 $x^{(de)}$ がゼロとなった. | |
| 4010 | 除数 $g^{(de)}$ がゼロとなった. | |

(6) **注意事項**

(a) このサブルーチンは行列の性質を十分活用しているので 2.2.2 $\left\{\begin{matrix}\text{DBGMSL}\\ \text{RBGMSL}\end{matrix}\right\}$を用いるよりもメモリ使用量や計算効率の点で優れているが, 反面, 行列が正則であっても原理的に解を求められない場合がある. 特に計算過程で, 除数となる $x^{(de)}$ や $g^{(de)}$ が 0 に近くなった場合, 得られる解の信頼性は保証されない (2.1.3 使用しているアルゴリズム参照).

(7) **使用例**

(a) 問 題

$$\begin{bmatrix} r_0 & r_{-1} & r_{-2} & r_{-3} \\ r_1 & r_0 & r_{-1} & r_{-2} \\ r_2 & r_1 & r_0 & r_{-1} \\ r_3 & r_2 & r_1 & r_0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ b_4 \end{bmatrix}$$

を解く.

(b) 入力データ

行列 $R$ の成分を格納する配列 $\mathrm{R} = \{\mathrm{r}_{-3}, \mathrm{r}_{-2}, \mathrm{r}_{-1}, \mathrm{r}_0, \mathrm{r}_1, \mathrm{r}_2, \mathrm{r}_3\}$

N=4, ISW=1, 定数ベクトル $\boldsymbol{b}$

**補足:** $\mathrm{R} = \{\mathrm{r}_3, \mathrm{r}_2, \mathrm{r}_1, \mathrm{r}_0, \mathrm{r}_{-1}, \mathrm{r}_{-2}, \mathrm{r}_{-3}\}$, ISW = 2 とすることによって同じ問題を解くことができる.

(c) 主プログラム

```
      PROGRAM BBTOSL
! *** EXAMPLE OF DBTOSL ***
      IMPLICIT REAL(8) (A-H,O-Z)
      PARAMETER (LNA = 4)
      DIMENSION R(2*LNA-1)
      DIMENSION B(LNA),X(LNA),W(2*LNA)
!
      READ (5,*) ISW
      READ (5,*) N
      WRITE (6,1000) ISW, N
      READ (5,*) (R(I),I=1,2*N-1)
      DO 10 I = 1, N
         WRITE (6,1100) (R(N+I-J),J=1,N)
   10 CONTINUE
      WRITE (6,1200)
      DO 20 I = 1, N
         READ (5,*) B(I)
         WRITE (6,1100) B(I)
   20 CONTINUE
      WRITE (6,1300)
      CALL DBTOSL (R, N, B, X, W, ISW, IERR)
      WRITE (6,1400) 'DBTOSL',IERR
      IF (IERR .GE. 3000) STOP
      WRITE (6,1600)
      DO 30 I = 1, N
         WRITE (6,1100) X(I)
   30 CONTINUE
      STOP
!
 1000 FORMAT(' ',/,/,&
             ' ***  DBTOSL  ***',/,&
             2X,'**  INPUT  **',/,&
             6X,'ISW =',I3,/,&
             6X,'N =',I3,/,&
             6X,'COEFFICIENT MATRIX')
 1100 FORMAT(7X,10(F11.4))
 1200 FORMAT(6X,'CONSTANT VECTOR')
 1300 FORMAT(2X,'**  OUTPUT  **')
 1400 FORMAT(6X,'IERR (',A6,') =',I5)
 1600 FORMAT(6X,'SOLUTION')
      END
```

(d) 出力結果

```
***  DBTOSL  ***
 **  INPUT  **
     ISW =  1
     N =  4
     COEFFICIENT MATRIX
           1.0000    -2.0000    -3.0000    -4.0000
           2.0000     1.0000    -2.0000    -3.0000
           3.0000     2.0000     1.0000    -2.0000
           4.0000     3.0000     2.0000     1.0000
     CONSTANT VECTOR
```

```
         -8.0000
         -2.0000
          4.0000
         10.0000
**  OUTPUT  **
    IERR (DBTOSL) =    0
    SOLUTION
          1.0000
          1.0000
          1.0000
          1.0000
```

## 2.18.2 DBTSSL, RBTSSL
## 連立 1 次方程式 (対称 Toeplitz 行列)

(1) **機 能**

$n$ 個の要素 $r_k$ $(k = 0, 1, \cdots, n-1)$ で構成される $n$ 次の対称 Toeplitz 行列 $R$

$$R = \begin{bmatrix} r_0 & r_1 & r_2 & \cdots & r_{n-2} & r_{n-1} \\ r_1 & r_0 & r_1 & \cdots & r_{n-3} & r_{n-2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & & \ddots & \vdots & \vdots \\ r_{n-2} & r_{n-3} & r_{n-4} & \cdots & r_0 & r_1 \\ r_{n-1} & r_{n-2} & r_{n-3} & \cdots & r_1 & r_0 \end{bmatrix}$$

を係数行列とする連立 1 次方程式 $R\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$:

$$\sum_{j=1}^{n} r_{|i-j|} x_j = b_i \quad (i = 1, \cdots, n)$$

を解く.

(2) **使用法**

倍精度サブルーチン:

CALL DBTSSL (R, N, B, X, W, IERR)

単精度サブルーチン:

CALL RBTSSL (R, N, B, X, W, IERR)

(3) **引 数**

D:倍精度実数型　Z:倍精度複素数型　I: $\left\{\begin{array}{l}\text{32 ビット整数版では INTEGER(4)}\\ \text{64 ビット整数版では INTEGER(8)}\end{array}\right\}$
R:単精度実数型　C:単精度複素数型

| 項番 | 引数名 | 型 | 大きさ | 入出力 | 内　　容 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | R | $\left\{\begin{matrix}\mathrm{D}\\ \mathrm{R}\end{matrix}\right\}$ | N | 入 力 | Toeplitz 行列 $R$ の構成要素 $r_k$ $(k = 0, 1, \cdots, n-1)$ |
| 2 | N | I | 1 | 入 力 | 行列 $R$ の次数 $n$ |
| 3 | B | $\left\{\begin{matrix}\mathrm{D}\\ \mathrm{R}\end{matrix}\right\}$ | N | 入 力 | 定数ベクトル$\boldsymbol{b}$ |
| 4 | X | $\left\{\begin{matrix}\mathrm{D}\\ \mathrm{R}\end{matrix}\right\}$ | N | 出 力 | 解ベクトル$\boldsymbol{x}$ |
| 5 | W | $\left\{\begin{matrix}\mathrm{D}\\ \mathrm{R}\end{matrix}\right\}$ | N | ワーク | 作業領域 |
| 6 | IERR | I | 1 | 出 力 | エラーインディケータ |

(4) **制限条件**

(a) N $> 0$

(b) R(1) $\neq 0$

(5) **エラーインディケータ**

| IERR の値 | 意　　　　　　味 | 処　理　内　容 |
|---|---|---|
| 0 | 正常終了. | |
| 1000 | N = 1 であった. | X(1) ← B(1)/R(1) とする. |
| 3000 | 制限条件 (a) を満足しなかった. | 処理を打ち切る. |
| 3010 | 制限条件 (b) を満足しなかった. | |
| 4000 | 除数 $x^{(de)}$ がゼロとなった. | |

(6) **注意事項**

(a) このサブルーチンは行列の性質を十分活用しているので 2.2.2 $\left\{\begin{matrix}\text{DBGMSL}\\ \text{RBGMSL}\end{matrix}\right\}$ を用いるよりもメモリ使用量や計算効率の点で優れているが, 反面, 行列が正則であっても原理的に解を求められない場合がある. 特に計算過程で, 除数となる $x^{(de)}$ が 0 に近くなった場合, 得られる解の信頼性は保証されない (2.1.3 使用しているアルゴリズム参照).

(7) **使用例**

(a) 問 題

$$\begin{bmatrix} r_0 & r_1 & r_2 & r_3 \\ r_1 & r_0 & r_1 & r_2 \\ r_2 & r_1 & r_0 & r_1 \\ r_3 & r_2 & r_1 & r_0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ b_4 \end{bmatrix}$$

を解く.

(b) 入力データ

行列 $R$ の成分を格納する配列 $\mathrm{R} = \{\mathrm{r}_0, \mathrm{r}_1, \mathrm{r}_2, \mathrm{r}_3\}$

N=4, 定数ベクトル $\boldsymbol{b}$

(c) 主プログラム

```
      PROGRAM BBTSSL
! *** EXAMPLE OF DBTSSL ***
      IMPLICIT REAL(8) (A-H,O-Z)
      PARAMETER (LNA = 4)
      DIMENSION R(LNA)
      DIMENSION B(LNA),X(LNA),W(LNA)
!
      READ (5,*) N
      WRITE (6,1000) N
      READ (5,*) (R(I),I=1,N)
      DO 10 I = 1, N
         WRITE (6,1100) (R(1+ABS(I-J)),J=1,N)
   10 CONTINUE
      WRITE (6,1200)
      DO 20 I = 1, N
         READ (5,*) B(I)
         WRITE (6,1100) B(I)
   20 CONTINUE
      WRITE (6,1300)
      CALL DBTSSL (R, N, B, X, W, IERR)
      WRITE (6,1400) 'DBTSSL',IERR
      IF (IERR .GE. 3000) STOP
      WRITE (6,1600)
      DO 30 I = 1, N
         WRITE (6,1100) X(I)
   30 CONTINUE
      STOP
!
 1000 FORMAT(' ',/,/,&
             ' ***  DBTSSL  ***',/,&
             2X,'**  INPUT  **',/,&
             6X,'N =',I3,/,&
             6X,'COEFFICIENT MATRIX')
 1100 FORMAT(7X,10(F11.4))
 1200 FORMAT(6X,'CONSTANT VECTOR')
 1300 FORMAT(2X,'**  OUTPUT  **')
 1400 FORMAT(6X,'IERR (',A6,') =',I5)
 1600 FORMAT(6X,'SOLUTION')
      END
```

(d) 出力結果

```
*** DBTSSL ***
 ** INPUT **
    N = 4
    COEFFICIENT MATRIX
          1.0000     2.0000     3.0000     4.0000
          2.0000     1.0000     2.0000     3.0000
          3.0000     2.0000     1.0000     2.0000
          4.0000     3.0000     2.0000     1.0000
    CONSTANT VECTOR
         10.0000
          8.0000
          8.0000
         10.0000
 ** OUTPUT **
    IERR (DBTSSL) =    0
    SOLUTION
          1.0000
          1.0000
          1.0000
          1.0000
```

### 2.18.3 DBVMSL, RBVMSL
### 連立 1 次方程式 (Vandermonde 行列)

(1) **機 能**

相異なる $n$ 個の要素 $v_k$ $(k = 1, 2, \cdots, n)$ で構成される $n$ 次の Vandermonde 行列 $V$

$$V = \begin{bmatrix} 1 & v_1 & v_1^2 & \cdots & v_1^{n-2} & v_1^{n-1} \\ 1 & v_2 & v_2^2 & \cdots & v_2^{n-2} & v_2^{n-1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & & \ddots & \vdots & \vdots \\ 1 & v_{n-1} & v_{n-1}^2 & \cdots & v_{n-1}^{n-2} & v_{n-1}^{n-1} \\ 1 & v_n & v_n^2 & \cdots & v_n^{n-2} & v_n^{n-1} \end{bmatrix}$$

を係数行列とする連立 1 次方程式 $V\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$:

$$\sum_{j=1}^{n} v_i^{j-1} x_j = b_i \quad (i = 1, \cdots, n)$$

または $V^T$ を係数行列とする連立 1 次方程式 $V^T\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$:

$$\sum_{j=1}^{n} v_j^{i-1} x_j = b_i \quad (i = 1, \cdots, n)$$

を解く．なお, Vandermonde 行列を係数とする連立 1 次方程式は本質的に悪条件であり, $n$ が極めて小さい場合以外は解を精度良く求めることは難しい (注意事項 (a) 参照).

(2) **使用法**

倍精度サブルーチン:

CALL DBVMSL (V, N, B, X, W, ISW, IERR)

単精度サブルーチン:

CALL RBVMSL (V, N, B, X, W, ISW, IERR)

## (3) 引 数

D:倍精度実数型　Z:倍精度複素数型
R:単精度実数型　C:単精度複素数型

I: $\left\{\begin{matrix}\text{32 ビット整数版では INTEGER(4)}\\ \text{64 ビット整数版では INTEGER(8)}\end{matrix}\right\}$

| 項番 | 引数名 | 型 | 大きさ | 入出力 | 内　　　容 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | V | $\left\{\begin{matrix}\mathrm{D}\\ \mathrm{R}\end{matrix}\right\}$ | N | 入 力 | Vandermonde 行列 $V$ の構成要素<br>$v_k$ $(k = 1, 2, \cdots, n)$ |
| 2 | N | I | 1 | 入 力 | 行列 $V$ の次数 $n$ |
| 3 | B | $\left\{\begin{matrix}\mathrm{D}\\ \mathrm{R}\end{matrix}\right\}$ | N | 入 力 | 定数ベクトル$\boldsymbol{b}$ |
| 4 | X | $\left\{\begin{matrix}\mathrm{D}\\ \mathrm{R}\end{matrix}\right\}$ | N | 出 力 | 解ベクトル$\boldsymbol{x}$ |
| 5 | W | $\left\{\begin{matrix}\mathrm{D}\\ \mathrm{R}\end{matrix}\right\}$ | N | ワーク | 作業領域 (注意事項 (b) 参照) |
| 6 | ISW | I | 1 | 入 力 | 処理スイッチ<br>1: $V\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ を解く<br>2: $V^T\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ を解く |
| 7 | IERR | I | 1 | 出 力 | エラーインディケータ |

## (4) 制限条件

(a) ISW $\in \{1, 2\}$

(b) N $> 0$

(c) V$(i) \neq 0$ $(i = 1, \ldots, \mathrm{N})$

## (5) エラーインディケータ

| IERR の値 | 意　　　味 | 処 理 内 容 |
|---|---|---|
| 0 | 正常終了. | |
| 1000 | N = 1 であった. | X(1) ← B(1) とする. |
| 3000 | 制限条件 (a) を満足しなかった. | 処理を打ち切る. |
| 3010 | 制限条件 (b) を満足しなかった. | |
| 3020 | 制限条件 (c) を満足しなかった. | |
| 4000 | 演算途中でゼロ除算が発生した. | |

## (6) 注意事項

(a) このサブルーチンは行列の性質を活用しているので 2.2.2 $\left\{\begin{matrix}\mathrm{DBGMSL}\\ \mathrm{RBGMSL}\end{matrix}\right\}$ を用いるよりもメモリ使用量の点で優れているが, ピボッティングを行わずに逆行列を経由して解を求める分, 計算精度の点で劣る場合がある. なお, いずれにせよ, Vandermonde 行列を係数とする連立 1 次方程式は本質的に悪条件であり, N が極めて小さい場合以外は解を精度良く求めることは難しい. 倍精度のサブルーチンを用いた場合でも, 解き得る問題の大きさ N の最大値は 15 程度である. また, $V^T$ を係数とする連立 1 次方程式の方が $V$ を係数とする連立 1 次方程式よりも通常は性質が良い.

(b) 作業領域 W には次式で定義されるマスター多項式 $P(x)$ の各項の係数 $w_j$ が格納される.

$$P(x) = \prod_{k=1}^{n}(x - v_k) = x^n + w_1 x^{n-1} + \cdots + w_{n-1}x + w_n$$

## (7) 使用例

(a) 問 題

$$\begin{bmatrix} 1 & v_1 & v_1^2 & v_1^3 \\ 1 & v_2 & v_2^2 & v_2^3 \\ 1 & v_3 & v_3^2 & v_3^3 \\ 1 & v_4 & v_4^2 & v_4^3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ b_4 \end{bmatrix}$$

を解く.

(b) 入力データ

行列 $V$ の成分を格納する配列 $\mathrm{V} = \{\mathrm{v}_1, \mathrm{v}_2, \mathrm{v}_3, \mathrm{v}_4\}$

N=4, ISW=1, 定数ベクトル $\boldsymbol{b}$

(c) 主プログラム

```
      PROGRAM BBVMSL
! *** EXAMPLE OF DBVMSL ***
      IMPLICIT REAL(8) (A-H,O-Z)
      PARAMETER (LNA = 4)
      DIMENSION V(LNA)
      DIMENSION B(LNA),X(LNA),W(LNA)
!
      READ (5,*) ISW
      READ (5,*) N
      WRITE (6,1000) ISW, N
      READ (5,*) (V(I),I=1,N)
      DO 10 I = 1, N
         WRITE (6,1100) (V(I)**(J-1),J=1,N)
   10 CONTINUE
      WRITE (6,1200)
      DO 20 I = 1, N
         READ (5,*) B(I)
         WRITE (6,1100) B(I)
   20 CONTINUE
      WRITE (6,1300)
      CALL DBVMSL (V, N, B, X, W, ISW, IERR)
      WRITE (6,1400) 'DBVMSL',IERR
      IF (IERR .GE. 3000) STOP
      WRITE (6,1600)
      DO 30 I = 1, N
         WRITE (6,1100) X(I)
   30 CONTINUE
      STOP
!
 1000 FORMAT(' ',/,/,&
             ' ***  DBVMSL  ***',/,&
             2X,'**  INPUT  **',/,&
             6X,'ISW =',I3,/,&
             6X,'N =',I3,/,&
             6X,'COEFFICIENT MATRIX')
 1100 FORMAT(7X,10(F11.4))
 1200 FORMAT(6X,'CONSTANT VECTOR')
 1300 FORMAT(2X,'**  OUTPUT  **')
 1400 FORMAT(6X,'IERR (',A6,') =',I5)
 1600 FORMAT(6X,'SOLUTION')
      END
```

(d) 出力結果

```
***  DBVMSL  ***
 **  INPUT  **
     ISW =  1
     N =  4
     COEFFICIENT MATRIX
           1.0000     2.0000     4.0000     8.0000
           1.0000     3.0000     9.0000    27.0000
           1.0000     4.0000    16.0000    64.0000
           1.0000     5.0000    25.0000   125.0000
     CONSTANT VECTOR
          15.0000
          40.0000
          85.0000
         156.0000
 **  OUTPUT  **
     IERR (DBVMSL) =    0
     SOLUTION
```

```
1.0000
1.0000
1.0000
1.0000
```

## 2.19 実上三角行列 (2 次元配列型)

### 2.19.1 DBTUSL, RBTUSL
### 連立 1 次方程式 (実上三角行列)

(1) **機 能**

実上三角行列 $A$(2 次元配列型) を係数行列とする連立 1 次方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ を解く.

(2) **使用法**

倍精度サブルーチン:

CALL DBTUSL (A, LNA, N, B, IERR)

単精度サブルーチン:

CALL RBTUSL (A, LNA, N, B, IERR)

(3) **引 数**

D:倍精度実数型　Z:倍精度複素数型　I: $\left\{\begin{array}{l}\text{32 ビット整数版では INTEGER(4)}\\\text{64 ビット整数版では INTEGER(8)}\end{array}\right\}$
R:単精度実数型　C:単精度複素数型

| 項番 | 引数名 | 型 | 大きさ | 入出力 | 内　容 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | A | $\left\{\begin{matrix}\text{D}\\\text{R}\end{matrix}\right\}$ | LNA, N | 入 力 | 係数行列 $A$(実上三角行列, 2 次元配列型) |
| 2 | LNA | I | 1 | 入 力 | 配列 A の整合寸法 |
| 3 | N | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の次数 |
| 4 | B | $\left\{\begin{matrix}\text{D}\\\text{R}\end{matrix}\right\}$ | N | 入 力 | 定数ベクトル$\boldsymbol{b}$ |
| | | | | 出 力 | 解$\boldsymbol{x}$ |
| 5 | IERR | I | 1 | 出 力 | エラーインディケータ |

(4) **制限条件**

(a) 0 < N ≤ LNA

(5) **エラーインディケータ**

| IERR の値 | 意　味 | 処 理 内 容 |
|---|---|---|
| 0 | 正常終了. | |
| 1000 | N=1 であった. | B(1) ← B(1)/A(1, 1) とする. |
| 2100 | 係数行列 A の対角要素の中に, 0 に近いものがあった. 精度の良い結果が得られない場合がある. | 処理を続ける. |
| 3000 | 制限条件 (a) を満足しなかった. | 処理を打ち切る. |
| $4000 + i$ | 係数行列 $A$ が 0.0 の対角要素を持つ.<br>$i$ は, 0.0 である最初の対角要素の番号である.<br>行列 $A$ は特異である. | |

(6) **注意事項**

なし

(7) **使用例**

(a) 問 題

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 & -3 & 4 \\ 0 & 4 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 5 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 8 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -10 \\ -9 \\ -3 \\ -16 \end{bmatrix}$$ を解く.

(b) 入力データ

係数行列 $A$, LNA=11, N=4, 定数ベクトル$\boldsymbol{b}$

(c) 主プログラム

```
      PROGRAM BBTUSL
! *** EXAMPLE OF DBTUCO,DBTULS ***
      IMPLICIT REAL(8) (A-H,O-Z)
      PARAMETER (LNA = 11)
      DIMENSION A(LNA,LNA),B(LNA),W1(LNA)
!
      READ (5,*) N
      WRITE (6,1000) N
      DO 20 I = 1, N
         DO 10 J = 1, N
            A(I,J) = 0.0D0
   10    CONTINUE
   20 CONTINUE
      DO 30 I = 1, N
         READ (5,*) (A(I,J),J=I,N)
         WRITE (6,1100) (A(I,J),J=1,N)
   30 CONTINUE
      READ (5,*) (B(I),I=1,N)
      WRITE (6,1200) (B(I),I=1,N)
      WRITE (6,1300)
      CALL DBTUCO (A,LNA,N,COND,W1,IERR)
      WRITE (6,1400) 'DBTUCO',IERR
      IF (IERR .GE. 3000) STOP
      COND = 1.0D0/COND
      CALL DBTUSL (A,LNA,N,B,KERR)
      WRITE (6,1400) 'DBTUSL',KERR
      WRITE (6,1500) COND
      WRITE (6,1600) (I,B(I),I=1,N)
      STOP
!
 1000 FORMAT(' ',/,/,&
              ' ***  DBTUCO,DBTUSL   ***',/,&
             2X,'**  INPUT  **',/,&
             6X,'N =',I3,/,&
             6X,'COEFFICIENT MATRIX')
 1100 FORMAT(7X,4(F11.4))
 1200 FORMAT(6X,'CONSTANT VECTOR',/,(7X,F10.4))
 1300 FORMAT(2X,'**  OUTPUT  **')
 1400 FORMAT(6X,'IERR (',A6,') =',I5)
 1500 FORMAT(6X,'CONDITION NUMBER =',D18.10)
 1600 FORMAT(6X,'SOLUTION',/,(8X,'X(',I2,') =',D18.10))
      END
```

(d) 出力結果

```
***  DBTUCO,DBTUSL  ***
 **  INPUT  **
     N =  4
     COEFFICIENT MATRIX
           1.0000     2.0000    -3.0000     4.0000
           0.0000     4.0000    -1.0000     1.0000
           0.0000     0.0000     5.0000    -1.0000
           0.0000     0.0000     0.0000     8.0000
     CONSTANT VECTOR
        -10.0000
         -9.0000
         -3.0000
        -16.0000
 **  OUTPUT  **
     IERR (DBTUCO) =    0
     IERR (DBTUSL) =    0
     CONDITION NUMBER =  0.1074561404D+02
     SOLUTION
       X( 1) = -0.1000000000D+01
       X( 2) = -0.2000000000D+01
       X( 3) = -0.1000000000D+01
       X( 4) = -0.2000000000D+01
```

## 2.19.2 DBTUCO, RBTUCO<br>実上三角行列の条件数

(1) **機 能**

実上三角行列 $A$(2 次元配列型) の条件数を求める.

(2) **使用法**

倍精度サブルーチン:

CALL DBTUCO (A, LNA, N, COND, W1, IERR)

単精度サブルーチン:

CALL RBTUCO (A, LNA, N, COND, W1, IERR)

(3) **引 数**

D:倍精度実数型 Z:倍精度複素数型 I: $\left\{\begin{array}{l}\text{32 ビット整数版では INTEGER(4)}\\\text{64 ビット整数版では INTEGER(8)}\end{array}\right\}$
R:単精度実数型 C:単精度複素数型

| 項番 | 引数名 | 型 | 大きさ | 入出力 | 内 容 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | A | $\begin{Bmatrix}D\\R\end{Bmatrix}$ | LNA, N | 入 力 | 実上三角行列 $A$(2 次元配列型) |
| 2 | LNA | I | 1 | 入 力 | 配列 A の整合寸法 |
| 3 | N | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の次数 |
| 4 | COND | $\begin{Bmatrix}D\\R\end{Bmatrix}$ | 1 | 出 力 | 条件数の逆数 |
| 5 | W1 | $\begin{Bmatrix}D\\R\end{Bmatrix}$ | N | ワーク | 作業領域 |
| 6 | IERR | I | 1 | 出 力 | エラーインディケータ |

(4) **制限条件**

(a) $0 < \mathrm{N} \leq \mathrm{LNA}$

(5) **エラーインディケータ**

| IERR の値 | 意 味 | 処 理 内 容 |
|---|---|---|
| 0 | 正常終了. | |
| 1000 | N=1 であった. | COND ← 1.0 とする. |
| 2100 | 係数行列 A の対角要素の中に, 0 に近いものがあった. 精度の良い結果が得られない場合がある. | 処理を続ける. |
| 3000 | 制限条件 (a) を満足しなかった. | 処理を打ち切る. |
| $4000 + i$ | 行列 $A$ が 0.0 の対角要素を持つ.<br>$i$ は, 0.0 である最初の対角要素の番号である. | |

(6) **注意事項**

(a) 条件数は $\|A\| \cdot \|A^{-1}\|$ で定義されるが, このサブルーチンで求められるのはその概算値である.

### 2.19.3 DBTUDI, RBTUDI
### 実上三角行列の行列式と逆行列

(1) **機 能**

実上三角行列 $A$(2 次元配列型) の行列式と逆行列を求める.

(2) **使用法**

倍精度サブルーチン:

CALL DBTUDI (A, LNA, N, DET, ISW, IERR)

単精度サブルーチン:

CALL RBTUDI (A, LNA, N, DET, ISW, IERR)

(3) **引 数**

D:倍精度実数型　Z:倍精度複素数型
R:単精度実数型　C:単精度複素数型
I: { 32 ビット整数版では INTEGER(4) / 64 ビット整数版では INTEGER(8) }

| 項番 | 引数名 | 型 | 大きさ | 入出力 | 内　　容 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | A | {D/R} | LNA, N | 入 力 | 実上三角行列 $A$(2 次元配列型) |
| | | | | 出 力 | 行列 $A$ の逆行列 (注意事項 (a) 参照) |
| 2 | LNA | I | 1 | 入 力 | 配列 A の整合寸法 |
| 3 | N | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の次数 |
| 4 | DET | {D/R} | 2 | 出 力 | 行列 $A$ の行列式の値 (注意事項 (b) 参照) |
| 5 | ISW | I | 1 | 入 力 | 処理スイッチ<br>ISW>0:行列式の値を求める.<br>ISW=0:行列式の値と逆行列を求める.<br>ISW<0:逆行列を求める. |
| 6 | IERR | I | 1 | 出 力 | エラーインディケータ |

(4) **制限条件**

(a) $0 < \mathrm{N} \leq \mathrm{LNA}$

(5) **エラーインディケータ**

| IERR の値 | 意　　味 | 処 理 内 容 |
|---|---|---|
| 0 | 正常終了. | |
| 1000 | N=1 であった. | $\mathrm{DET}(1) \leftarrow \mathrm{A}(1,1)$, $\mathrm{DET}(2) \leftarrow 0.0$<br>$\mathrm{A}(1,1) \leftarrow 1.0/\mathrm{A}(1,1)$ とする. |
| 3000 | 制限条件 (a) を満足しなかった. | 処理を打ち切る. |

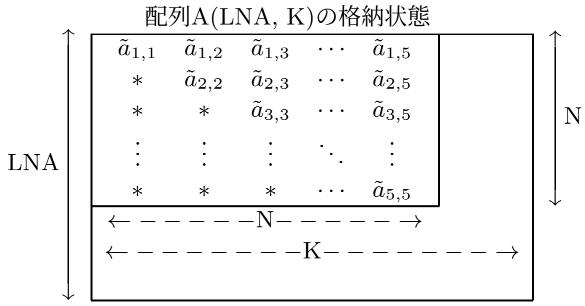
(6) **注意事項**

(a) 上三角行列の逆行列はやはり上三角行列であるので, 逆行列 $A^{-1}$ は配列 A の上三角部分のみに格納される.

図 2−16　逆行列 (上三角行列) の格納状態

逆行列 $A^{-1}$

$$\begin{bmatrix} \tilde{a}_{1,1} & \tilde{a}_{1,2} & \tilde{a}_{1,3} & \cdots & \tilde{a}_{1,5} \\ 0.0 & \tilde{a}_{2,2} & \tilde{a}_{2,3} & \cdots & \tilde{a}_{2,5} \\ 0.0 & 0.0 & \tilde{a}_{3,3} & \cdots & \tilde{a}_{3,5} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0.0 & 0.0 & 0.0 & \cdots & \tilde{a}_{5,5} \end{bmatrix} \Rightarrow$$




**備　考**
a.　LNA $\geq$ N, N $\leq$ K を満たさなければならない.
b.　$*$ に対応する入力時の値は保証されない.

(b) 行列式の値は次の式で与えられる.
$det(A) = \mathrm{DET}(1) \times 10^{\mathrm{DET}(2)}$
このとき, $1.0 \leq |\mathrm{DET}(1)| < 10.0$ となるようにスケーリングされている.

(c) **行列の次数が 100 以下など十分に小さい場合や, 逆行列そのものが必要である場合を除いて, 逆行列を計算すべきではない.** 数値計算では多くの場合, 逆行列は, $A^{-1}\boldsymbol{b}$ や $A^{-1}B$ といった形式で現れるが, これらはそれぞれ, ベクトル $\boldsymbol{x}$ についての連立 1 次方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$, 行列 $X$ についての多重右辺連立 1 次方程式 $AX = B$ として連立 1 次方程式を解いて計算すべきである. 数学的には, 逆行列を求めて逆行列とベクトルの積や逆行列と行列の積を計算することと前述のような連立 1 次方程式を解くことは同じであるが, 数値計算上は一般に, 逆行列による求解は計算効率も悪く, 計算精度も劣る.

## 2.20 実下三角行列 (2 次元配列型)

### 2.20.1 DBTLSL, RBTLSL 連立 1 次方程式 (実下三角行列)

(1) **機 能**

実下三角行列 $A$(2 次元配列型) を係数行列とする連立 1 次方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ を解く.

(2) **使用法**

倍精度サブルーチン:

CALL DBTLSL (A, LNA, N, B, IERR)

単精度サブルーチン:

CALL RBTLSL (A, LNA, N, B, IERR)

(3) **引 数**

D:倍精度実数型　Z:倍精度複素数型　I: { 32 ビット整数版では INTEGER(4) / 64 ビット整数版では INTEGER(8) }
R:単精度実数型　C:単精度複素数型

| 項番 | 引数名 | 型 | 大きさ | 入出力 | 内容 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | A | {D/R} | LNA, N | 入 力 | 係数行列 $A$(実下三角行列, 2 次元配列型) |
| 2 | LNA | I | 1 | 入 力 | 配列 A の整合寸法 |
| 3 | N | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の次数 |
| 4 | B | {D/R} | N | 入 力 | 定数ベクトル$\boldsymbol{b}$ |
| | | | | 出 力 | 解$\boldsymbol{x}$ |
| 5 | IERR | I | 1 | 出 力 | エラーインディケータ |

(4) **制限条件**

(a) $0 < \mathrm{N} \leq \mathrm{LNA}$

(5) **エラーインディケータ**

| IERR の値 | 意味 | 処理内容 |
|---|---|---|
| 0 | 正常終了 | |
| 1000 | N=1 であった | B(1) ← B(1)/A(1) とする |
| 2100 | 係数行列 A の対角要素の中に, 0 に近いものがあった. 精度の良い結果が得られない場合がある. | 処理を続ける. |
| 3000 | 制限条件 (a) を満足しなかった | 処理を打ち切る. |
| $4000 + i$ | 係数行列 $A$ が 0.0 の対角要素を持つ. $i$ は 0.0 である最初の対角要素の番号である. 行列 $A$ は特異である. | |

(6) **注意事項**

なし

(7) **使用例**

(a) 問 題

$$\begin{bmatrix} 5 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 4 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 2 & 0 \\ 3 & 2 & 7 & 10 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 5 \\ 3 \\ 5 \\ 22 \end{bmatrix}$$ を解く

(b) 入力データ

係数行列 $A$, LNA=11, N=4, 定数ベクトル$\boldsymbol{b}$

(c) 主プログラム

```
      PROGRAM BBTLSL
! *** EXAMPLE OF DBTLCO,DBTLSL ***
      IMPLICIT REAL(8) (A-H,O-Z)
      PARAMETER (LNA = 11)
      DIMENSION A(LNA,LNA),B(LNA),W1(LNA)
!
      READ (5,*) N
      WRITE (6,1000) N
      DO 20 I = 1, N
         DO 10 J = 1, N
            A(I,J) = 0.0D0
   10    CONTINUE
   20 CONTINUE
      DO 30 I = 1, N
         READ (5,*) (A(I,J),J=1,I)
         WRITE (6,1100) (A(I,J),J=1,N)
   30 CONTINUE
      READ (5,*) (B(I),I=1,N)
      WRITE (6,1200) (B(I),I=1,N)
      WRITE (6,1300)
      CALL DBTLCO (A,LNA,N,COND,W1,IERR)
      WRITE (6,1400) 'DBTLCO',IERR
      IF (IERR .GE. 3000) STOP
      COND = 1.0D0/COND
      CALL DBTLSL (A,LNA,N,B,KERR)
      WRITE (6,1400) 'DBTLSL',KERR
      WRITE (6,1500) COND
      WRITE (6,1600) (I,B(I),I=1,N)
      STOP
!
 1000 FORMAT(' ',/,/,&
              ' ***  DBTLCO,DBTLSL  ***',/,&
              2X,'**  INPUT  **',/,&
              6X,'N =',I3,/,&
              6X,'COEFFICIENT MATRIX ')
 1100 FORMAT(4X,4(F11.4))
 1200 FORMAT(6X,'CONSTANT VECTOR',/,(7X,F10.4))
 1300 FORMAT(2X,'**  OUTPUT  **')
 1400 FORMAT(6X,'IERR (',A6,') =',I5)
 1500 FORMAT(6X,'CONDITION NUMBER =',D18.10)
 1600 FORMAT(6X,'SOLUTION',/,(8X,'X(',I2,') =',D18.10))
      END
```

(d) 出力結果

```
***  DBTLCO,DBTLSL  ***
 **  INPUT  **
     N =  4
     COEFFICIENT MATRIX
        5.0000     0.0000     0.0000     0.0000
       -1.0000     4.0000     0.0000     0.0000
        2.0000     1.0000     2.0000     0.0000
        3.0000     2.0000     7.0000    10.0000
     CONSTANT VECTOR
          5.0000
          3.0000
          5.0000
         22.0000
 **  OUTPUT  **
     IERR (DBTLCO) =    0
     IERR (DBTLSL) =    0
     CONDITION NUMBER =  0.6966071429D+01
     SOLUTION
       X( 1) =  0.1000000000D+01
       X( 2) =  0.1000000000D+01
       X( 3) =  0.1000000000D+01
       X( 4) =  0.1000000000D+01
```

.

## 2.20.2 DBTLCO, RBTLCO 実下三角行列の条件数

(1) **機 能**

実下三角行列 $A$(2 次元配列型) の条件数を求める

(2) **使用法**

倍精度サブルーチン:

CALL DBTLCO (A, LNA, N, COND, W1, IERR)

単精度サブルーチン:

CALL RBTLCO (A, LNA, N, COND, W1, IERR)

(3) **引 数**

D:倍精度実数型　Z:倍精度複素数型　I: {32 ビット整数版では INTEGER(4) / 64 ビット整数版では INTEGER(8)}
R:単精度実数型　C:単精度複素数型

| 項番 | 引数名 | 型 | 大きさ | 入出力 | 内　容 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | A | {D/R} | LNA, N | 入 力 | 実下三角行列 $A$(2 次元配列型) |
| 2 | LNA | I | 1 | 入 力 | 配列 A の整合寸法 |
| 3 | N | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の次数 |
| 4 | COND | {D/R} | 1 | 出 力 | 条件数の逆数 |
| 5 | W1 | {D/R} | N | ワーク | 作業領域 |
| 6 | IERR | I | 1 | 出 力 | エラーインディケータ |

(4) **制限条件**

(a) $0 < \mathrm{N} \leq \mathrm{LNA}$

(5) **エラーインディケータ**

| IERR の値 | 意　味 | 処 理 内 容 |
|---|---|---|
| 0 | 正常終了 | |
| 1000 | $\mathrm{N} = 1$ であった | COND ← 1.0 とする |
| 2100 | 係数行列 A の対角要素の中に, 0 に近いものがあった. 精度の良い結果が得られない場合がある. | 処理を続ける. |
| 3000 | 制限条件 (a) を満足しなかった | 処理を打ち切る. |
| $4000 + i$ | 行列 $A$ が 0.0 の対角要素を持つ. $i$ は 0.0 である最初の対角要素の番号である. | |

(6) **注意事項**

(a) 条件数は $\|A\| \cdot \|A^{-1}\|$ で定義されるが, このサブルーチンで求められるのはその概算値である

## 2.20.3 DBTLDI, RBTLDI 実下三角行列の行列式と逆行列

(1) **機 能**

実下三角行列 $A$(2 次元配列型) の行列式と逆行列を求める

(2) **使用法**

倍精度サブルーチン:

CALL DBTLDI (A, LNA, N, DET, ISW, IERR)

単精度サブルーチン:

CALL RBTLDI (A, LNA, N, DET, ISW, IERR)

(3) **引 数**

D:倍精度実数型　Z:倍精度複素数型　I: { 32 ビット整数版では INTEGER(4) / 64 ビット整数版では INTEGER(8) }
R:単精度実数型　C:単精度複素数型

| 項番 | 引数名 | 型 | 大きさ | 入出力 | 内　容 |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | A | {D/R} | LNA, N | 入 力 | 実下三角行列 $A$(2 次元配列型) |
| | | | | 出 力 | 行列 $A$ の逆行列 (注意事項 (a) 参照) |
| 2 | LNA | I | 1 | 入 力 | 配列 A の整合寸法 |
| 3 | N | I | 1 | 入 力 | 行列 $A$ の次数 |
| 4 | DET | {D/R} | 2 | 出 力 | 行列 $A$ の行列式の値 (注意事項 (b) 参照) |
| 5 | ISW | I | 1 | 入 力 | 処理スイッチ<br>ISW>0:行列式の値を求める<br>ISW=0:行列式の値と逆行列を求める<br>ISW<0:逆行列を求める |
| 6 | IERR | I | 1 | 出 力 | エラーインディケータ |

(4) **制限条件**

(a) $0 < \mathrm{N} \leq \mathrm{LNA}$

(5) **エラーインディケータ**

| IERR の値 | 意　味 | 処 理 内 容 |
|---|---|---|
| 0 | 正常終了 | |
| 1000 | N=1 であった | $\mathrm{DET}(1) \leftarrow \mathrm{A}(1,1)$, $\mathrm{DET}(2) \leftarrow 0.0$<br>$\mathrm{A}(1,1) \leftarrow 1.0/\mathrm{A}(1,1)$ とする |
| 3000 | 制限条件 (a) を満足しなかった | 処理を打ち切る. |

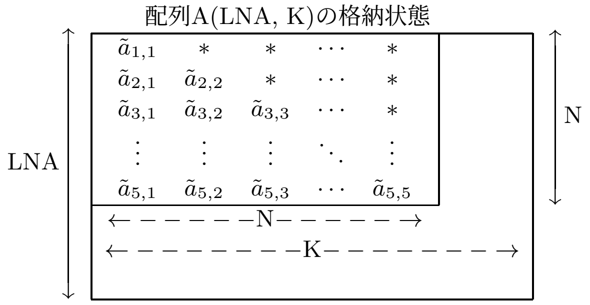
(6) **注意事項**

(a) 下三角行列の逆行列はやはり下三角行列であるので, 逆行列 $A^{-1}$ は配列 A の下三角部分のみに格納される

図 2−17　逆行列 (下三角行列) の格納状態

逆行列 $A^{-1}$

$$\begin{bmatrix} \tilde{a}_{1,1} & 0.0 & 0.0 & \cdots & 0.0 \\ \tilde{a}_{2,1} & \tilde{a}_{2,2} & 0.0 & \cdots & 0.0 \\ \tilde{a}_{3,1} & \tilde{a}_{3,2} & \tilde{a}_{3,3} & \cdots & 0.0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \tilde{a}_{5,1} & \tilde{a}_{5,2} & \tilde{a}_{5,3} & \cdots & \tilde{a}_{5,5} \end{bmatrix} \Rightarrow$$




**備　考**

a.　LNA ≥ N, N ≤ K を満たさなければならない

b.　∗ に対応する入力時の値は保証されない

(b) 行列式の値は次の式で与えられる

$det(A) = \mathrm{DET}(1) \times 10^{\mathrm{DET}(2)}$

このとき, $1.0 \leq |\mathrm{DET}(1)| < 10.0$ となるようにスケーリングされている

(c) **行列の次数が 100 以下など十分に小さい場合や, 逆行列そのものが必要である場合を除いて, 逆行列を計算すべきではない.** 数値計算では多くの場合, 逆行列は, $A^{-1}\boldsymbol{b}$ や $A^{-1}B$ といった形式で現れるが, これらはそれぞれ, ベクトル $\boldsymbol{x}$ についての連立 1 次方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$, 行列 $X$ についての多重右辺連立 1 次方程式 $AX = B$ として連立 1 次方程式を解いて計算すべきである. 数学的には, 逆行列を求めて逆行列とベクトルの積や逆行列と行列の積を計算することと前述のような連立 1 次方程式を解くことは同じであるが, 数値計算上は一般に, 逆行列による求解は計算効率も悪く, 計算精度も劣る.

# 付 録 A　　用語説明

(1) **行列**

$m \times n$ の行列 $A$ とは, $m \times n$ 個の元 $a_{i,j}$ $(i = 1, 2, \cdots, m;\ j = 1, 2, \cdots, n)$ の矩形の配置をいう.

$$\begin{bmatrix} a_{1,1} & a_{1,2} & \cdots & a_{1,n} \\ a_{2,1} & a_{2,2} & \cdots & a_{2,n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m,1} & a_{m,2} & \cdots & a_{m,n} \end{bmatrix}$$

元 $a_{i,j}$ を行列 $A$ の $(i, j)$ 要素と呼ぶ. 行列の元としては, 複素数または実数を考える. 特に, 複素数を元とする行列を複素行列, 実数を元とする行列を実行列と呼ぶ. また, 特に $m = n$ である場合, 行列 $A$ を正方行列と呼ぶ. 行列 $A$ は, $(a_{ij})$ と略記する場合がある. なお, 本書では必要に応じて行の添字 $i$ と列の添字 $j$ を区別するために $(a_{i,j})$ を用いる.

(2) **(数) ベクトル**

$1 \times n$ の行列を $n$ 次の行ベクトル, $m \times 1$ の行列を $m$ 次の列ベクトルと呼ぶ. 両者を特に区別する必要がない場合には単にベクトルと呼ぶ. なお, 数学的にはさらに抽象化した概念としてベクトルを定義し, ここで述べた「ベクトル」は数ベクトルと呼ばれる. 抽象化したベクトルの定義については「ベクトル空間」についての説明を参照されたい.

(3) **行列積**

2 つの行列 $A = (a_{i,j})$, $B = (b_{k,l})$ において, 行列 $A$ の列数と行列 $B$ の行数が等しい場合にのみ行列積 $A \boldsymbol{\cdot} B = (c_{i,l})$ が定義されて,

$$c_{i,l} = \sum_j a_{i,j} \boldsymbol{\cdot}\, b_{j,l}$$

となる.

(4) **行列ベクトル積**

行列積 $A \boldsymbol{\cdot} B$ において, 特に行列 $B$ が列ベクトル$\boldsymbol{x}$である場合, 積 $A\boldsymbol{x}$ を行列ベクトル積という.

(5) **行列の転置**

$m \times n$ の行列 $A = (a_{i,j})$ $(i = 1, 2, \cdots, m;\ j = 1, 2, \cdots, n)$ において行と列を入れ換えてできる行列 $A' = (a_{j,i})$ を行列 $A$ の転置行列と呼び, $A^T$ で表す. なお, 転置行列は ${}^tA$ と表す場合もある.

(6) **行列の (主) 対角**

$n \times n$ の正方行列 $A = (a_{i,j})$ $(i, j = 1, 2, \cdots, n)$ において, $a_{i,i}$ $(i = 1, 2, \cdots, n)$ の並びを (主) 対角と呼び, その要素を (主) 対角要素と呼ぶ. また特に, 対角にのみ非零要素 $a_{i,i}$ を持つ行列を対角行列 $(\mathrm{diag}(a_{i,i}))$ と呼ぶ.

(7) **単位行列**

$n \times n$ の対角行列 $A$=$\mathrm{diag}(a_{i,i})$ において, 対角要素 $a_{i,i}$ $(i = 1, 2, \cdots, n)$ がすべて 1 の行列を単位行列と呼び, 記号 $E$ または $I$ を用いて表す.

(8) **逆行列**

正方行列 $A$ に対して, $A \cdot B = B \cdot A = E$ ($E$ は単位行列) を満たす正方行列 $B$ が存在する場合に, 行列 $B$ を行列 $A$ の逆行列と呼び, 記号 $A^{-1}$ で表す.

(9) **一般逆行列**

$m \times n$ の行列 $A$ に対して, 以下の関係を満たすような $n \times m$ 行列 $X$ が一意的に存在し, この行列 $X$ を行列 $A$ の (Moore-Penrose の) 一般逆行列と呼び, 記号 $A^\dagger$ で表す.

- $AXA \ = \ A$
- $XAX \ = \ X$
- $(AX)^T \ = \ AX$
- $(XA)^T \ = \ XA$

(10) **行列の下三角ならびに上三角**

$n \times n$ の正方行列 $A = (a_{i,j})\ (i, j = 1, 2, \cdots, n)$ において, $a_{i,j}\ (i > j)$ の要素をまとめて下三角, $a_{i,j}\ (i < j)$ の要素をまとめて上三角と呼ぶ. なお, 上三角ならびに下三角の定義に対角を含める場合もある. 対角を含めた下三角にのみ非零要素を持つ行列を下三角行列, 対角を含めた上三角にのみ非零要素を持つ行列を上三角行列とそれぞれ呼ぶ.

(11) **共役転置行列**

複素行列 $A$ の各要素の共役な複素数を要素とする行列の転置行列を共役転置行列と呼び, 記号 $A^*$ で表す. 行列の要素が実数の場合には $A^* = A^T$ である.

(12) **対称行列**

$A = A^T$ が成立する正方行列を対称行列と呼ぶ. 対称行列では, $a_{i,j} = a_{j,i}$ である.

(13) **エルミート行列**

$A = A^*$ が成立する正方行列をエルミート行列と呼ぶ. エルミート行列では, $a_{i,j}$ と $a_{j,i}$ は複素共役である.

(14) **ユニタリ行列**

$UU^* = I(I$ は単位行列) が成立する正方行列 $U$ をユニタリ行列と呼ぶ.

(15) **直交行列**

$AA^T = I(I$ は単位行列) が成立する実正方行列 $A$ を直交行列と呼ぶ.

(16) **行列の副対角**

$n \times n$ の正方行列 $A = (a_{i,j})\ (i, j = 1, 2, \cdots, n)$ において, $a_{i,i+p}\ (i = 1, 2, \cdots, n-p)$ の並びを第 $p$ 上副対角, $a_{i+q,i}\ (i = 1, 2, \cdots, n-q)$ の並びを第 $q$ 下副対角と呼び, その要素を, それぞれ第 $p$ 上副対角要素, 第 $q$ 下副対角要素と呼ぶ. また, 両者をまとめて単に副対角要素と呼ぶこともある.

(17) **バンド行列**

$n \times n$ の正方行列 $A = (a_{i,j})\ (i, j = 1, 2, \cdots, n)$ において, 主対角とそれに隣接するいくつかの上副対角ならびに下副対角にのみ 0 でない要素がある行列をバンド行列と呼ぶ. 対角からもっともはなれた 0 でない要素を含む副対角が第 $u$ 上副対角と第 $l$ 下副対角である場合に, 値 $u$ と $l$ をそれぞれ上バンド幅, 下バンド幅と呼ぶ. 特に, $u = l$ の場合これを単にバンド幅と呼ぶ.

(18) **3 重対角行列**

特に, 上バンド幅ならびに下バンド幅が 1 の行列を 3 重対角行列と呼ぶ.

(19) **ヘッセンベルグ行列**

$n \times n$ の正方行列 $A = (a_{i,j})\ (i, j = 1, 2, \cdots, n)$ において, 第 1 下副対角を除いた下三角のすべての要素が 0 である行列をヘッセンベルグ行列と呼ぶ. 行列の固有値を求める場合に, 一般の行列をこの行列に変換する.

(20) **準上三角行列**

$n \times n$ の正方行列 $A = (a_{i,j})$ $(i, j = 1, 2, \cdots, n)$ において, 第 1 下副対角の連続する 2 つの副対角要素の少なくとも一方が必ず 0 であり, 第 1 下副対角を除いた下三角のすべての要素が 0 である行列を準上三角行列行列と呼ぶ. ヘッセンベルグ行列の特殊な場合である.

(21) **スパース行列**

一般に, 非零要素の数が全要素数に比べて少ない行列をスパース行列と呼ぶ. スパース行列のうちで要素の並びに規則性があり, この規則性を活用することによって, 問題を解く有効な解法が作成されている場合に, この行列を特に, 規則スパース行列と呼んでいる. 規則スパース行列でない行列は, 不規則スパースと呼ばれている. たとえば, バンド幅が小さいバンド行列は規則スパース行列の一種である.

(22) **正則行列, 特異行列**

正方行列 $A$ が逆行列を持つとき, 行列 $A$ は正則 (*regular*) であるという. 正則でない行列は特異 (*singular*) であるという. 正則な行列を係数に持つ連立 1 次方程式の解は, 一意に定まる. ただし現実には, 有限桁で計算を行うので, 丸め誤差の影響が避けられず, 正則な行列と特異な行列の区別は曖昧になる. たとえば, 数学的に特異な行列を用いて数値的に連立 1 次方程式を解いた場合でも, 見かけ上解が得られる場合がある. したがって, 特にほとんど特異な行列を係数に持つ連立 1 次方程式を解く場合, 見かけ上得られる解については, その妥当性について十分な吟味が必要である.

(23) **LU 分解**

直接法で, 連立 1 次方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ を解く場合には, まず係数行列 $A$ を下三角行列 $L$ と上三角行列 $U$ の積に $A = LU$ と分解する. この分解のことを LU 分解と呼ぶ. このような分解を行えば, 連立 1 次方程式の解$\boldsymbol{x}$は

$$\begin{aligned} L\boldsymbol{y} &= \boldsymbol{b} \\ U\boldsymbol{x} &= \boldsymbol{y} \end{aligned}$$

を逐次解くことによって得られる. この 2 つの連立 1 次方程式は係数行列が三角行列であるので前進代入ならびに後退代入を用いて容易に解くことができる. なお, 行列 A の LU 分解は $A$ が正則であれば, たとえば行列 $L$ の対角要素を 1 に固定することによって一意に定まる. また, 連立 1 次方程式を解く場合には, 一般に部分軸選択を行いながら LU 分解を行うので, 軸選択による行交換行列を $P$ として $PA = LU$ を満たす三角行列 $L, U$ をそれぞれ求める.

(24) **$\mathrm{U^TDU}$ 分解**

連立 1 次方程式の係数行列が対称行列である場合には, 軸選択を行わないで LU 分解を行って得られる下三角行列 $L$ と上三角行列 $U$ の間には, $L = U^T D$ の関係がある. ここで $D$ は対角行列である. したがって, $L$ または $U$ の片方と $D$ のみを陽に求めれば, 連立 1 次方程式を解くことができる. 係数行列から $U$ と $D$ を陽に求める分解を $\mathrm{U^TDU}$ 分解と呼ぶ.

(25) **$\mathrm{U^*DU}$ 分解**

連立 1 次方程式の係数行列がエルミート行列である場合には, 軸選択を行わないで LU 分解を行って得られる下三角行列と上三角行列 U の間には, $L = U^* D$ の関係がある. ここで $D$ は対角行列である. したがって, $L$ または $U$ の片方と $D$ のみを陽に求めれば, 連立 1 次方程式を解くことができる. 係数行列から $U$ と $D$ を陽に求める分解を $\mathrm{U^*DU}$ 分解と呼ぶ.

(26) **正定値 (Positive definite)**

実対称行列またはエルミート行列 $A$ は, 任意のベクトル$\boldsymbol{x}$ $(\boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{0})$ に対して, $\boldsymbol{x}^* A\boldsymbol{x} > 0$ を満たす場合, 正 (定) 値, $\boldsymbol{x}^* A\boldsymbol{x} < 0$ を満たす場合, 負値とそれぞれ呼ぶ. 行列 $A$ が正定値行列であることは, 次の 2 つの条件と同値である.

(a) 行列 $A$ の固有値がすべて正である.

(b) 行列 $A$ の主小行列式がすべて正である.

数学的には, 正定値行列は軸選択を行わなくても LU 分解することができるが, 現実には軸選択を行わなければ, 数値的に安定して LU 分解を行えない場合がある.

(27) **実数固有値 (Real eigenvalue)**

実数成分の正方行列の固有値が全て実数であることの必要十分条件は, 2 つの実対称行列の積であることである. また, 複素数成分の正方行列の固有値が全て実数であることの必要十分条件は, 2 つのエルミート行列の積であることである.

(28) **対角優位 (Diagonally dominant)**

$n \times n$ の正方行列 $A = (a_{i,j})$ $(i, j = 1, 2, \cdots, n)$ において,

$$|a_{i,i}| \;>\; \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{n} |a_{i,j}| \;\; (i = 1, 2, \cdots, n)$$

が成立する場合, 行列 $A$ を対角優位な行列と呼ぶ. 数学的には, 対角優位な行列は軸選択を行わなくても LU 分解することができるが, 現実には軸選択を行わなければ, 数値的に安定して LU 分解を行えない場合がある.

(29) **フィルイン (Fill-in)**

スパース行列を LU 分解する場合に, 元々0 であった要素が演算によって 0 でなくなることを, フィルインと呼ぶ.

(30) **エンベロプ法**

$n \times n$ の対称スパース行列 $A$ を $\mathrm{U^TDU}$ 分解する場合に, 行列 $A$ の各行の最初の非零要素と対角要素をエンベロプ (包絡線) と見立てて, 包絡線内の要素のみに着目して分解を実行する一方法をエンベロプ法と呼ぶ. 行列を $\mathrm{U^TDU}$ 分解する時, フィルインはエンベロプ内部でのみ発生することを用いた手法である. なお, エンベロプ法では, 対称行列の下三角部分に着目して分解を行うが, 上三角部分に着目して同様な分解を行う手法はスカイライン法として知られている.

(31) **ベクトル空間**

集合 $V$ が次の条件 (a), (b) を満足するとき, $V$ をベクトル空間とよびその要素をベクトルと呼ぶ.

(a) $V$ の 2 つの要素$\boldsymbol{a}$, $\boldsymbol{b}$に対して和 $\boldsymbol{a}+\boldsymbol{b}$ が $V$ の要素として一意に定まり, 次の性質を満たす.

i. $(\boldsymbol{a}+\boldsymbol{b})+\boldsymbol{c} = \boldsymbol{a}+(\boldsymbol{b}+\boldsymbol{c})$ (結合則)
ただし, $\boldsymbol{a}$, $\boldsymbol{b}$, $\boldsymbol{c}$は, $V$ の任意の要素.

ii. $\boldsymbol{a}+\boldsymbol{b} = \boldsymbol{b}+\boldsymbol{a}$ (交換則)
ただし, $\boldsymbol{a}$, $\boldsymbol{b}$は, $V$ の任意の要素.

iii. 零ベクトルと呼ばれる $V$ の要素$\boldsymbol{0}$が存在し, $V$ の任意の要素$\boldsymbol{a}$に対して, $\boldsymbol{a}+\boldsymbol{0} = \boldsymbol{a}$

iv. $V$ の任意の要素$\boldsymbol{a}$に対して, $\boldsymbol{a}+\boldsymbol{b} = \boldsymbol{0}$ となる $V$ の要素$\boldsymbol{b}$がただ一つ存在する. なお, このとき, $\boldsymbol{b}$は $-\boldsymbol{a}$ と表される.

(b) $V$ の任意の要素$\boldsymbol{a}$と複素数 $c$ に対して, $\boldsymbol{a}$の $c$ 倍 $c\boldsymbol{a}$ が $V$ の要素として一意に定まり, 次の性質を満たす (スカラ倍).

i. $c(\boldsymbol{a}+\boldsymbol{b}) = c\boldsymbol{a}+c\boldsymbol{b}$ (ベクトル分配則)

ii. $(c+d)\boldsymbol{a} = c\boldsymbol{a}+d\boldsymbol{a}$ (スカラ分配則)

iii. $(cd)\boldsymbol{a} = c(d\boldsymbol{a})$

iv. $1\boldsymbol{a} = \boldsymbol{a}$

(32) **一次結合, 一次独立, 一次従属**

ベクトル空間 $V$ の $k$ 個のベクトル $\boldsymbol{a}_1,\ \cdots,\ \boldsymbol{a}_k$ と複素数 $c_1,\ \cdots,\ c_k$ とによって作られるベクトル

$$c_1\boldsymbol{a}_1 + \cdots + c_k\boldsymbol{a}_k$$

を $\boldsymbol{a}_1,\ \cdots,\ \boldsymbol{a}_k$ の一次結合といい, $c_1,\ \cdots,\ c_k$ をその係数という. すべてが 0 ではないある係数 $c_1,\ \cdots,\ c_k$ に対して

$$c_1\boldsymbol{a}_1 + \cdots + c_k\boldsymbol{a}_k = \boldsymbol{0}$$

となるとき, ベクトルの集合 $\{\boldsymbol{a}_1,\ \cdots,\ \boldsymbol{a}_k\}$ は一次従属であるといい, そうでないときは, 一次独立であるという.

(33) **基底**

$S$ をベクトル空間 $V$ の任意の部分集合とし, $S$ に含まれる一次独立なベクトルの組を $\{\boldsymbol{a}_1,\ \cdots,\ \boldsymbol{a}_k\}$ とする. $S$ の任意のベクトル$\boldsymbol{b}$に対して $\{\boldsymbol{a}_1,\ \cdots,\ \boldsymbol{a}_k,\ \boldsymbol{b}\}$ が一次従属であるとき, $\{\boldsymbol{a}_1,\ \cdots,\ \boldsymbol{a}_k\}$ は $S$ において極大であると呼ばれ, $S$ としてベクトル空間 $V$ そのものをとった場合, この一次独立なベクトルの組をベクトル空間 $V$ の基底と呼ぶ. なお, $V$ の基底を構成するベクトルの個数を $V$ の次元と呼ぶ. また, $n$ 次元ベクトル空間 $V_n$ の任意の基底を $\{\boldsymbol{u}_1,\ \cdots,\ \boldsymbol{u}_n\}$ とすると, $V_n$ の任意のベクトル$\boldsymbol{a}$ は, $\{\boldsymbol{u}_1,\ \cdots,\ \boldsymbol{u}_n\}$ の一次結合として一意に表される.

(34) **部分 (ベクトル) 空間**

ベクトル空間 $V$ の部分集合 $L$ は, 次の条件 (a), (b) を満足するとき, $V$ の部分 (ベクトル) 空間と呼ばれる.

(a) $\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b} \in L$ ならば $\boldsymbol{a} + \boldsymbol{b} \in L$

(b) $\boldsymbol{a} \in L$, $c$ が複素数ならば $c\boldsymbol{a} \in L$

(35) **一次変換**

$V_n$, $V_m$ をそれぞれ $n$ 次元, $m$ 次元のベクトル空間とする. $V_n$ の各要素$\boldsymbol{x}$を $V_m$ の要素 $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})$ に対応させる写像 $\boldsymbol{A} : V_n \to V_m$ が次の二つの条件を満たすとき, $\boldsymbol{A}$を $V_n$ から $V_m$ への一次変換とよぶ.

(a) $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}_1 + \boldsymbol{x}_2) = \boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}_1) + \boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}_1)\ \ \boldsymbol{x}_1,\ \boldsymbol{x}_2 \in V_n$

(b) $\boldsymbol{A}(c\boldsymbol{x}) = c\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})\ \ \boldsymbol{x} \in V_n,\ c$ は複素数

$V_n$, $V_m$ それぞれのひとつの基底を $\{\boldsymbol{u}_1,\ \cdots,\ \boldsymbol{u}_n\}$, $\{\boldsymbol{v}_1,\ \cdots,\ \boldsymbol{v}_m\}$ とすると

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{u}_j) = \sum_{i=1}^{m} a_{i,j}\boldsymbol{v}_i \quad (j = 1, \cdots, n)$$

の係数行列 $A = (a_{i,j})$ によって, 任意の $\boldsymbol{x} \in V_n$ に対する $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})$ が定められる. 行列 $A$ をこの基底に関する一次変換$\boldsymbol{A}$ の表現行列という. また, $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{x},\ \boldsymbol{x} \in V_n$ なる一次変換 $\boldsymbol{E} : V_n \to V_n$ を定義して, 恒等変換とよぶ. 恒等変換の表現行列は基底の取りかたによらず常に単位行列 $E$ になる.

(36) **固有値・固有ベクトル**

$n$ 次元ベクトル空間 $V_n$ の中の一次変換$\boldsymbol{A}$に対して

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}) = \lambda\boldsymbol{x} \text{すなわち} (\boldsymbol{A} - \lambda\boldsymbol{E})(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{0}$$

を満たすような数 $\lambda$ とベクトル $\boldsymbol{x}(\boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{0})$ が存在するとき, $\lambda$ を$\boldsymbol{A}$の固有値といい, $\boldsymbol{x}$を固有値 $\lambda$ に属する固有ベクトルという. ここで, $\boldsymbol{E}$は恒等変換である. $V_n$ の中で基底を一つ定めて, 一次変換$\boldsymbol{A}$の表現行列を $A$, 固有ベクトル$\boldsymbol{x}$に対応する数ベクトルを $\hat{\boldsymbol{x}}$ とすると, 固有値 $\lambda$ と $\hat{\boldsymbol{x}}$ は次式を満たす.

$$A\hat{\boldsymbol{x}} = \lambda\hat{\boldsymbol{x}}$$

ここで $\hat{\boldsymbol{x}}$ は, $\boldsymbol{x}$の成分 $x_1, \cdots, x_n$ を用いて

$$\hat{\boldsymbol{x}} = \begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}$$

表される. なお, 普通, $\lambda$ と $\hat{\boldsymbol{x}}$ は行列 $A$ の固有値, 固有ベクトルとそれぞれ呼ばれ, 本書においてもこの呼称を採用する. また, 数ベクトルとベクトルを区別せず, $\boldsymbol{x}$と表す. 一次変換 $\boldsymbol{A} : V_n \to V_n$ の固有値 $\lambda$ に属するベクトル全体と零ベクトル$\mathbf{0}$をあわせたものは一つのベクトル空間をなすので, これを$\boldsymbol{A}$の固有値 $\lambda$ に属する固有ベクトル空間とよぶ.

(37) **不変部分空間**

ベクトル空間 $V_n$ の中の一次変換$\boldsymbol{A}$に対して $V_n$ の部分空間 $U$ が

$$\boldsymbol{A}(U) \subseteq U$$

という性質をもつとき, すなわち, 任意のベクトル$\boldsymbol{x}$に対して $\boldsymbol{Ax} \in U$ であるとき, $U$ は$\boldsymbol{A}$に関して不変 (*invariant*) であるといわれる. 特に, $\boldsymbol{A}$の固有ベクトル空間は$\boldsymbol{A}$に関して不変である. 不変な部分ベクトル空間を不変部分空間 (*invariant subspace*) と呼ぶ.

(38) **平面回転 (Plane rotation)**

次の様な行列 $S_{k:l}(\theta)$ で規定される直交変換を平面回転と呼ぶ.

$$S_{kl}(\theta) = \begin{bmatrix} E_{1:k-1} & O_{1:k-1,k:l} & O_{1:k-1,l:n} \\ O_{k:l,1:k-1} & T_{k:l}(\theta) & O_{k:l,l:n} \\ O_{l:n,1:k-1} & O_{l:n,k:l} & E_{l:n} \end{bmatrix}$$

ここで, $T_{k:l}(\theta)$ は

$$T_{k:l}(\theta) = \begin{bmatrix} \cos\theta & O_{k:k,k+1:l-1} & -\sin\theta \\ O_{k+1:l-1,k:k} & E_{k+1:l-1} & O_{k+1:l-1,l:l} \\ \sin\theta & O_{l:l,k+1:l-1} & \cos\theta \end{bmatrix}$$

$E_{p:q}$ は $q-p+1$ 次の単位行列で

$$E_{p:q} = \begin{array}{l} \begin{bmatrix} 1 & & & 0 \\ & 1 & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & 1 \end{bmatrix} \end{array} \begin{array}{l} (p \\ (p+1 \\ \vdots \\ (q \end{array}$$

$O_{p:r,q:s}$ は $r-p+1 \times s-q+1$ 次のゼロ行列

$$O_{p:r,q:s} = \begin{array}{c} \begin{array}{cccc} \underset{\smile}{q} & \underset{\smile}{q+1} & \ldots & \underset{\smile}{s} \end{array} \\ \begin{bmatrix} 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix} \end{array} \begin{array}{l} \\ (p \\ (p+1 \\ \vdots \\ (r \end{array}$$

いま $A=(a_{i,j})\ (i=1,2,\cdots,n; j=1,2,\cdots,n)$ の部分行列 $A_{p:r,q:s}$ を

$$A_{p:r,q:s}=\begin{bmatrix} a_{p,q} & a_{p,q+1} & \cdots & a_{p,s} \\ a_{p+1,q} & a_{p+1,q+1} & \cdots & a_{p+1,s} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{r,q} & a_{r,q+1} & \cdots & a_{r,s} \end{bmatrix}$$

と定義し, 行列 $A$ を

$$A=\begin{bmatrix} A_{1:k-1,1:k-1} & A_{1:k-1,k:l} & A_{1:k-1,l+1:n} \\ A_{k:l,1:k-1} & A_{k:l,k:l} & A_{k:l,l+1:n} \\ A_{l+1:n,1:k-1} & A_{l+1:n,k:l} & A_{l+1:n,l+1:n} \end{bmatrix}$$

と表す．この時

$$S_{k:l}(\theta)A=\begin{bmatrix} A_{1:k-1,1:k-1} & A_{1:k-1,k:l} & A_{1:k-1,l+1:n} \\ T_{k:l}(\theta)A_{k:l,1:k-1} & T_{k:l}(\theta)A_{k:l,k:l} & T_{k:l}(\theta)A_{k:l,l+1:n} \\ A_{l+1:n,1:k-1} & A_{l+1:n,k:l} & A_{l+1:n,l+1:n} \end{bmatrix}$$

$$T_{k:l}(\theta)A_{k:l,q:s}=\begin{bmatrix} \cos\theta a_{k,q}-\sin\theta a_{l,q} & \cdots & \cos\theta a_{k,r}-\sin\theta a_{l,s} \\ a_{k+1,q} & \cdots & a_{k+1,r} \\ \vdots & \cdots & \vdots \\ a_{l-1,q} & \cdots & a_{l-1,r} \\ \sin\theta a_{k,q}+\cos\theta a_{l,q} & \cdots & \sin\theta a_{k,r}+\cos\theta a_{l,s} \end{bmatrix}$$

したがって, $\tan\theta=\frac{a_{l,i}}{a_{k,i}}$ または $\tan\theta=-\frac{a_{l,i}}{a_{k,i}}(i=q,\cdots,s)$ を満たす様に $\theta$ を決定すれば, $S_{k:l}(\theta)A$ の第 $k$ 行と第 $l$ 行の要素のうち任意の 1 つの要素を 0 とすることができる．同様に

$$AS_{k:l}(-\theta)=\begin{bmatrix} A_{1:k-1,1:k-1} & A_{1:k-1,k:l}T_{k:l}(-\theta) & A_{1:k-1,l+1:n} \\ A_{k:l,1:k-1} & A_{k:l,k:l}T_{k:l}(-\theta) & A_{k:l,l+1:n} \\ A_{l+1:n,1:k-1} & A_{l+1:n,k:l}T_{k:l}(-\theta) & A_{l+1:n,l+1:n} \end{bmatrix}$$

$$A_{p:r,k:l}T_{k:l}(-\theta)=\begin{bmatrix} \cos\theta a_{p,k}-\sin\theta a_{p,l} & a_{p,k+1} & \cdots & a_{p,l-1} & \sin\theta a_{p,k}+\cos\theta a_{p,l} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \cos\theta a_{r,k}-\sin\theta a_{r,l} & a_{r,k+1} & \cdots & a_{r,l-1} & \sin\theta a_{r,k}+\cos\theta a_{r,l} \end{bmatrix}$$

したがって, $\tan\theta=\frac{a_{i,l}}{a_{i,k}}$ または $\tan\theta=-\frac{a_{i,l}}{a_{i,k}}(i=p,\cdots,r)$ を満たす様に $\theta$ を決定すれば, $AS_{k:l}(-\theta)$ の第 $k$ 列と第 $l$ 列の要素のうち任意の 1 つの要素を 0 とすることができる．なお,

$$S_{k:l}(-\theta)=S_{k:l}(\theta)^T$$

である．また

$$\tilde{A}=S_{k:l}(\theta)AS_{k:l}(-\theta)=\begin{bmatrix} A_{1:k-1,1:k-1} & A_{1:k-1,k:l}T_{k:l}(-\theta) & A_{1:k-1,l+1:n} \\ T_{k:l}(\theta)A_{k:l,1:k-1} & T_{k:l}(\theta)A_{k:l,k:l}T_{k:l}(-\theta) & T_{k:l}(\theta)A_{k:l,l+1:n} \\ A_{l+1:n,1:k-1} & A_{l+1:n,k:l}T_{k:l}(-\theta) & A_{l+1:n,l+1:n} \end{bmatrix}$$

となるので, 行列 $A$ が対称行列であれば, $\theta$ 調整することによって $\tilde{A} = S_{k:l}(\theta) A S_{k:l}(-\theta)$ の要素を $(\tilde{a}_{i,j})$ としてある $j (j \neq k, j \neq l)$ について

$$\tilde{a}_{k,j} = \tilde{a}_{j,k} = 0$$

または

$$\tilde{a}_{l,j} = \tilde{a}_{j,l} = 0$$

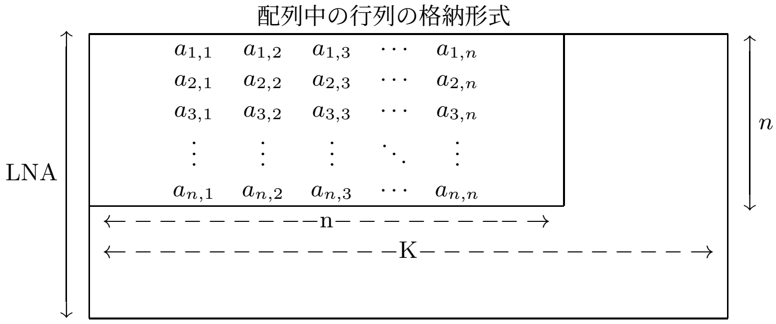
とすることができる.

# 付 録 B　配列データの取扱い方法

## B.1　行列に対応した配列データ

本ライブラリにおいては, しばしば行列に対応した配列データが使用されるが, 以下にその取扱い方法を述べる. 配列データを使用するサブルーチンを引用する場合, 利用者は引用する側のプログラム内で, その配列を宣言しておかなければならない. 宣言された配列を A (LNA, K) とすると, $n \times n$ 型行列 $A = (a_{i,j})$ $(i = 1, 2, \cdots, n;\ j = 1, 2, \cdots, n)$ は次の図のように格納される. この時の LNA を**整合寸法**という. 行列に対応した配列を引数として使用する場合に

図 B−1　配列中の行列の格納形式




**備　考**

a.　LNA$\geq n$, K$\geq n$ でなければならない.

b.　行列の要素 $a_{i,j}$ は配列の要素 A$(i, j)$ に対応する.

は, 引数として配列名, 次数のほかに, この整合寸法もサブルーチンに引渡さなければならない. これは, 行列の要素 $a_{i,j}$ $(i = 1, 2, \cdots$,LNA; $j = 1, 2, \cdots$,K) は, 配列の要素 A$(i, j)$ ($i$=1, 2, $\cdots$, LNA; $j$=1, 2, $\cdots$, K) と次のように主記憶上で対応している必要があるためである.

| | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|
| $a_{1,1}$ | $a_{2,1}$ | $\cdots$ | $a_{\mathrm{LNA},1}$ | $a_{1,2}$ | $a_{2,2}$ | $\cdots$ |
| $\updownarrow$ | $\updownarrow$ | $\cdots$ | $\updownarrow$ | $\updownarrow$ | $\updownarrow$ | $\cdots$ |
| A(1, 1) | A(2, 1) | $\cdots$ | A(LNA, 1) | A(1, 2) | A(2, 2) | $\cdots$ |

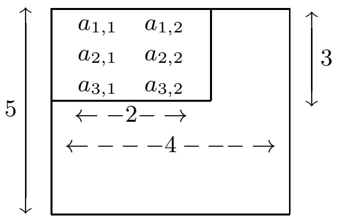
**例** DAM1AD(実行列の和) の場合

$3 \times 2$ 型行列 $A, B$ の和を行列 $C$ に求めるとする. 対応する配列 A, B, C の大きさをすべて (5, 4) で宣言すると, 宣言文および CALL 文は次のようになる.

```
      REAL(8) A(5, 4), B(5, 4), C(5, 4)
      INTEGER IERR
!
      CALL DAM1AD(A, 5, 3, 2, B, 5, C, 5, IERR)
```

配列 A には, データが次のように格納される. 配列 B, C についても同様である.

図 B–2　配列 A 中の格納形式



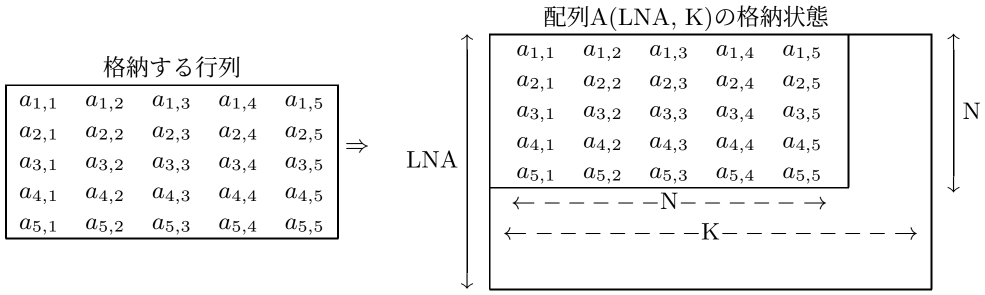

次数の異なるいくつかの配列をデータとして取り扱う場合には, そのうち最も大きな次数を LNA とするような配列を一つ用意しておけば, この配列を逐次利用することができる. ただし, この時, 整合寸法として常に LNA の値を与える必要がある.

## B.2　データの格納方法

行列データの格納方法は, その行列の型によって異なっている. 以下にその方法を示す.

### B.2.1　実行列 (2 次元配列型)

図 B−3　実行列 (2 次元配列型) の格納形式




**備　考**

a.　LNA $\geq$ N, K $\geq$ N を満たさなければならない.

## B.2.2　複素行列

(1) **2 次元配列型, 実数引数型**

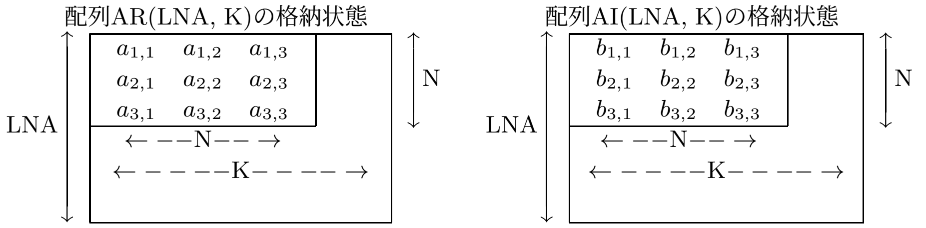
実部と虚部に分けて別々の配列に格納する.

図 B−4　複素行列 (2 次元配列型)(実数引数型) の格納形式

格納する行列

$$\begin{array}{|ccc|}\hline a_{1,1}+b_{1,1}i & a_{1,2}+b_{1,2}i & a_{1,3}+b_{1,3}i \\ a_{2,1}+b_{2,1}i & a_{2,2}+b_{2,2}i & a_{2,3}+b_{2,3}i \\ a_{3,1}+b_{3,1}i & a_{3,2}+b_{3,2}i & a_{3,3}+b_{3,3}i \\ \hline \end{array}$$

$$\Downarrow$$




**備　考**

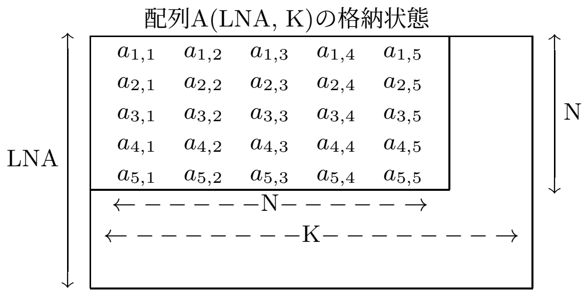
a.　LNA $\geq$ N, K $\geq$ N を満たさなければならない.

(2) **2 次元配列型, 複素引数型**

図 B−5　複素行列 (2 次元配列型)(複素引数型) の格納形式

格納する行列

$$\begin{array}{|ccccc|}\hline a_{1,1} & a_{1,2} & a_{1,3} & a_{1,4} & a_{1,5} \\ a_{2,1} & a_{2,2} & a_{2,3} & a_{2,4} & a_{2,5} \\ a_{3,1} & a_{3,2} & a_{3,3} & a_{3,4} & a_{3,5} \\ a_{4,1} & a_{4,2} & a_{4,3} & a_{4,4} & a_{4,5} \\ a_{5,1} & a_{5,2} & a_{5,3} & a_{5,4} & a_{5,5} \\ \hline \end{array} \Rightarrow$$



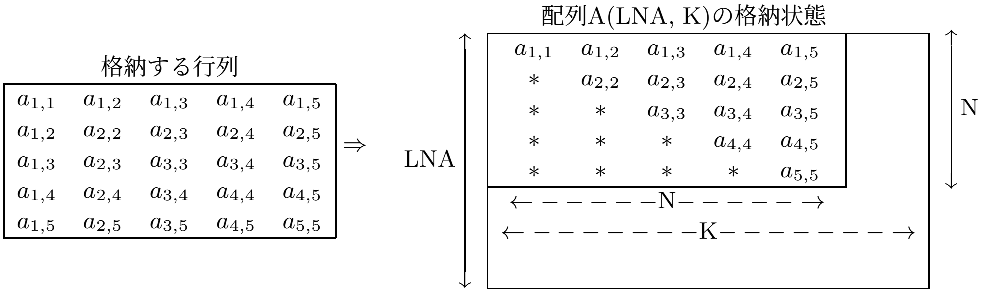

**備　考**

a.　LNA $\geq$ N, K $\geq$ N を満たさなければならない.

### B.2.3　実対称行列, 正値対称行列

#### (1) 2 次元配列型, 上三角型

図 B−6　実対称行列 (2 次元配列型)(上三角型) の格納形式



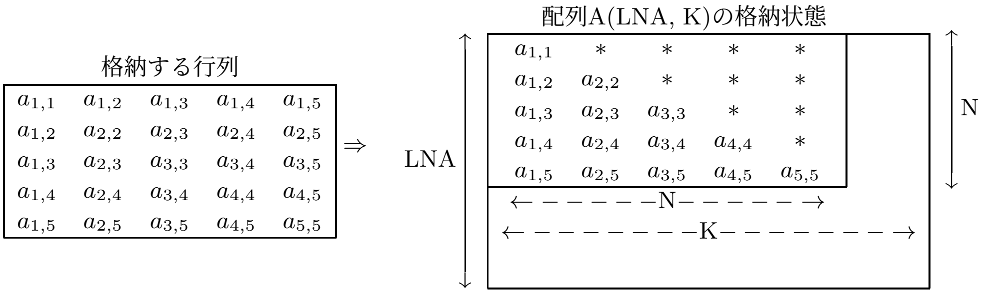

**備　考**

a.　$*$ は, 任意の値であることを示す.

b.　LNA $\geq$ N, K $\geq$ N を満たさなければならない.

#### (2) 2 次元配列型, 下三角型

図 B−7　実対称行列 (2 次元配列型)(下三角型) の格納形式




**備　考**

a.　$*$ は, 任意の値であることを示す.

b.　LNA $\geq$ N, K $\geq$ N を満たさなければならない.

### B.2.4 エルミート行列

(1) **2 次元配列型, 実数引数型, 上三角型**

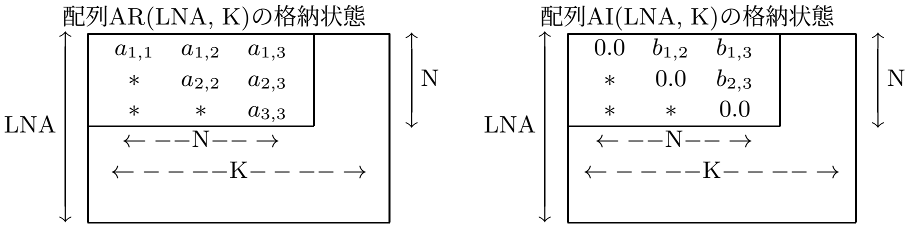
上三角部分の実部と虚部を別々の配列に格納する.

図 B−8　エルミート行列 (2 次元配列型)(実数引数型)(上三角型) の格納形式

格納する行列

$$\begin{array}{|ccc|}\hline a_{1,1} & a_{1,2}+b_{1,2}i & a_{1,3}+b_{1,3}i \\ a_{2,1}-b_{2,1}i & a_{2,2} & a_{2,3}+b_{2,3}i \\ a_{3,1}-b_{3,1}i & a_{3,2}-b_{3,2}i & a_{3,3} \\ \hline\end{array}$$

$\Downarrow$




**備　考**

a.　$*$ は, 任意の値であることを示す.

b.　LNA $\geq$ N, K $\geq$ N を満たさなければならない.

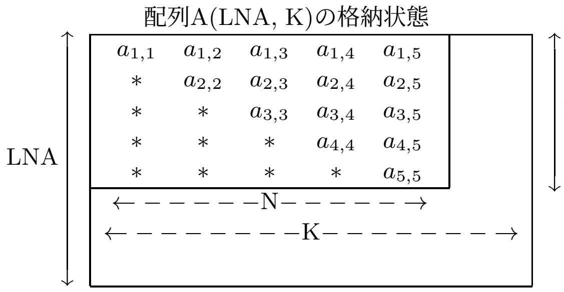
(2) **2 次元配列型, 複素引数型, 上三角型**

図 B−9　エルミート行列 (2 次元配列型)(複素引数型)(上三角型) の格納形式

格納する行列

$$\begin{array}{|ccccc|}\hline a_{1,1} & a_{1,2} & a_{1,3} & a_{1,4} & a_{1,5} \\ \overline{a_{1,2}} & a_{2,2} & a_{2,3} & a_{2,4} & a_{2,5} \\ \overline{a_{1,3}} & \overline{a_{2,3}} & a_{3,3} & a_{3,4} & a_{3,5} \\ \overline{a_{1,4}} & \overline{a_{2,4}} & \overline{a_{3,4}} & a_{4,4} & a_{4,5} \\ \overline{a_{1,5}} & \overline{a_{2,5}} & \overline{a_{3,5}} & \overline{a_{4,5}} & a_{5,5} \\ \hline\end{array}$$

$\Downarrow$




**備　考**

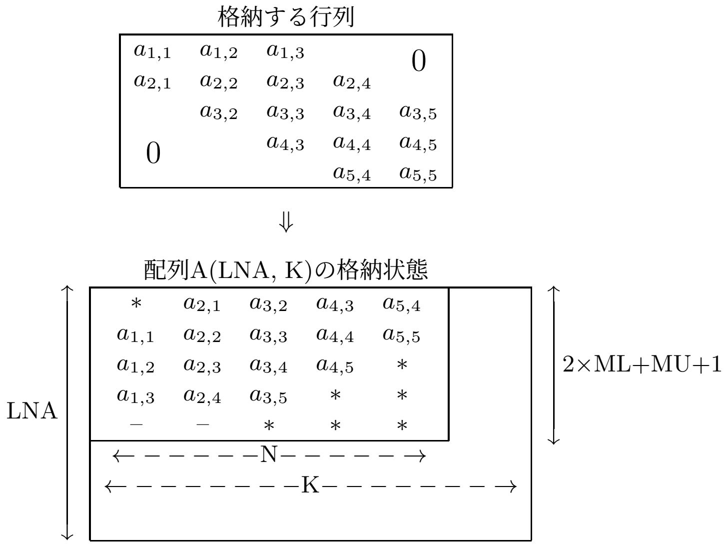
a.　$x$ の複素共役を $\overline{x}$ で表している.

b.　$*$ は, 任意の値であることを示す.

c.　LNA $\geq$ N, K $\geq$ N を満たさなければならない.

## B.2.5　実バンド行列 (バンド型)

図 B−10　実バンド行列 (バンド型) の格納形式




**備　考**

a.　$*$ は, 任意の値であることを示す.

b.　–は, 行列の LU 分解時に必要となる領域である.

c.　MU は上バンド幅, ML は下バンド幅である.

d.　$\mathrm{LNA} \geq 2 \times \mathrm{ML} + \mathrm{MU} + 1$, $\mathrm{K} \geq \mathrm{N}$ を満たさなければならない. (ただし, LU 分解を伴わない場合には, $\mathrm{LNA} \geq \mathrm{ML} + \mathrm{MU} + 1$, $\mathrm{K} \geq \mathrm{N}$ でよい).

### B.2.6 実対称バンド行列, 正値対称バンド行列 (対称バンド型)

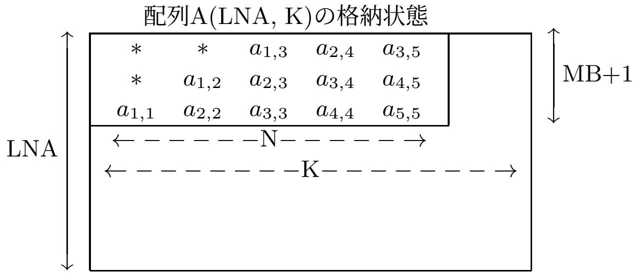
図 B−11 実対称バンド行列 (対称バンド型) の格納形式

格納する行列

$$\begin{bmatrix} a_{1,1} & a_{1,2} & a_{1,3} & & 0 \\ a_{1,2} & a_{2,2} & a_{2,3} & a_{2,4} & \\ a_{1,3} & a_{2,3} & a_{3,3} & a_{3,4} & a_{3,5} \\ 0 & a_{2,4} & a_{3,4} & a_{4,4} & a_{4,5} \\ & & a_{3,5} & a_{4,5} & a_{5,5} \end{bmatrix}$$

⇓

配列A(LNA, K)の格納状態




**備 考**

a. ∗ は, 任意の値であることを示す.
b. MB は, バンド幅である.
c. LNA ≥ MB + 1, K ≥ N を満たさなければならない.

### B.2.7 実 3 重対角行列 (ベクトル型)

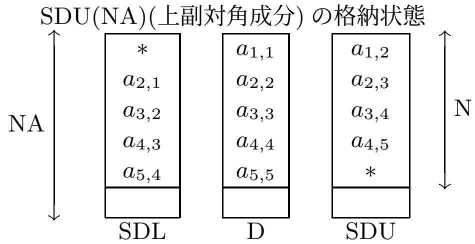
図 B−12 実 3 重対角行列 (ベクトル型) の格納形式

格納する行列

$$\begin{bmatrix} a_{1,1} & a_{1,2} & & & 0 \\ a_{2,1} & a_{2,2} & a_{2,3} & & \\ & a_{3,2} & a_{3,3} & a_{3,4} & \\ 0 & & a_{4,3} & a_{4,4} & a_{4,5} \\ & & & a_{5,4} & a_{5,5} \end{bmatrix}$$

⇓

配列SDL(NA)(下副対角成分),D(NA)(対角成分)
SDU(NA)(上副対角成分) の格納状態




**備 考**

a. ∗ は, 任意の値であることを示す.
b. NA ≥ N を満たさなければならない.

### B.2.8 実対称 3 重対角行列, 正値対称 3 重対角行列 (ベクトル型)

図 B−13 実対称 3 重対角行列 (ベクトル型) の格納形式

格納する行列

$$\begin{array}{|ccccc|}\hline a_{1,1} & a_{1,2} & & & \\ a_{1,2} & a_{2,2} & a_{2,3} & & 0 \\ & a_{2,3} & a_{3,3} & a_{3,4} & \\ 0 & & a_{3,4} & a_{4,4} & a_{4,5} \\ & & & a_{4,5} & a_{5,5} \\ \hline \end{array}$$

$$\Downarrow$$

配列D(NA)(対角成分),SD(NA)(副対角成分) の格納状態

$$\text{NA}\left\updownarrow\begin{array}{|c|} \hline a_{1,1} \\ a_{2,2} \\ a_{3,3} \\ a_{4,4} \\ a_{5,5} \\ \hline \\ \hline \end{array}\right. \quad \begin{array}{|c|} \hline a_{1,2} \\ a_{2,3} \\ a_{3,4} \\ a_{4,5} \\ * \\ \hline \\ \hline \end{array}\Big\updownarrow \text{N}$$

$$\begin{array}{cc} \text{D} & \text{SD} \end{array}$$

**備　考**

a. $*$ は, 任意の値であることを示す.

b. NA $\geq$ N を満たさなければならない.

### B.2.9 定係数型実 3 重対角行列 (スカラ型)

図 B−14 定係数型実 3 重対角行列の格納形式

格納する行列 ($a$)

$$\begin{array}{|ccccc|}\hline d & s & & & 0 \\ s & d & s & & \\ & s & d & s & \\ 0 & & s & d & s \\ & & & s & d \\ \hline \end{array}$$

格納する行列 ($b$)

$$\begin{array}{|ccccc|}\hline d & s & & & 0 \\ s & d & s & & \\ & s & d & s & \\ 0 & & s & d & s \\ & & & 2\times s & d \\ \hline \end{array}$$

格納する行列 ($c$)

$$\begin{array}{|ccccc|}\hline d & 2\times s & & & 0 \\ s & d & s & & \\ & s & d & s & \\ 0 & & s & d & s \\ & & & s & d \\ \hline \end{array}$$

格納する行列 ($d$)

$$\begin{array}{|ccccc|}\hline d & 2\times s & & & 0 \\ s & d & s & & \\ & s & d & s & \\ 0 & & s & d & s \\ & & & 2\times s & d \\ \hline \end{array}$$

$$\Downarrow$$

変数D(対角成分),SD(副対角成分) の格納状態

$$\begin{array}{cc} \text{D} & \text{SD} \\ \boxed{d} & \boxed{s} \end{array}$$

### B.2.10 三角行列

(1) **2 次元配列型**

実対称行列 (2 次元配列型)(上三角型) と格納方法は同じである.

## B.2.11　不規則スパース行列 (対称行列専用)

### (1) スパース型 (対称行列の場合)

図 B−15　実対称不規則スパース行列 (スパース型) の格納形式

格納する行列 $A$

$$\begin{array}{|cccccc|}\hline a_{1,1} & 0.0 & a_{1,3} & a_{1,4} & a_{1,5} & 0.0 \\ 0.0 & a_{2,2} & 0.0 & a_{2,4} & 0.0 & 0.0 \\ a_{1,3} & 0.0 & a_{3,3} & 0.0 & a_{3,5} & 0.0 \\ a_{1,4} & a_{2,4} & 0.0 & a_{4,4} & 0.0 & a_{4,6} \\ a_{1,5} & 0.0 & a_{3,5} & 0.0 & a_{5,5} & 0.0 \\ 0.0 & 0.0 & 0.0 & a_{4,6} & 0.0 & a_{6,6} \\ \hline\end{array}$$

$\Downarrow$

配列AVAL(NA),JCN(NA),IA(N)の格納状態

NA　　M

| AVAL | JCN |
|---|---|
| $a_{1,1}$ | 1 |
| $a_{1,3}$ | 3 |
| $a_{1,4}$ | 4 |
| $a_{1,5}$ | 5 |
| $a_{2,2}$ | 2 |
| $a_{2,4}$ | 4 |
| $a_{3,3}$ | 3 |
| $a_{3,5}$ | 5 |
| $a_{4,4}$ | 4 |
| $a_{4,6}$ | 6 |
| $a_{5,5}$ | 5 |
| $a_{6,6}$ | 6 |

N

| IA |
|---|
| 1 |
| 5 |
| 7 |
| 9 |
| 11 |
| 12 |

**備　考**

a.　M は, 元の行列 $A$ の上三角部の非零要素数.

b.　配列 AVAL には, 元の行列 $A$ の上三角部の非零要素を第 1 行から順番に格納する.

c.　配列 JCN には, 配列 AVAL に格納した各要素の元の行列 $A$ 上での列番号を格納する.

d.　配列 IA には, 対角要素の配列 A での位置を格納する.

e.　$\mathrm{N} \leq \mathrm{M} < \mathrm{NA}$ を満たさなければならない.

## B.2.12　不規則スパース行列

### (1) スパース型

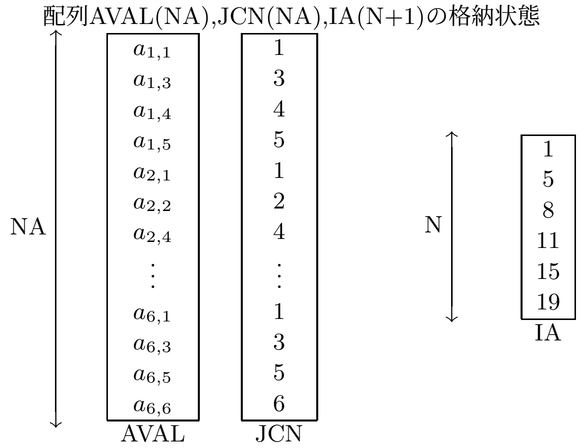
図 B−16　実非対称不規則スパース (スパース型) の格納形式

格納する行列 $A$

$$
\begin{array}{|cccccc|}
\hline
a_{1,1} & 0.0 & a_{1,3} & a_{1,4} & a_{1,5} & 0.0 \\
a_{2,1} & a_{2,2} & 0.0 & a_{2,4} & 0.0 & 0.0 \\
0.0 & a_{3,2} & a_{3,3} & 0.0 & a_{3,5} & 0.0 \\
a_{4,1} & a_{4,2} & 0.0 & a_{4,4} & 0.0 & a_{4,6} \\
a_{5,1} & 0.0 & a_{5,3} & a_{5,4} & a_{5,5} & 0.0 \\
a_{6,1} & 0.0 & a_{6,3} & 0.0 & a_{6,5} & a_{6,6} \\
\hline
\end{array}
$$

$\Downarrow$

配列AVAL(NA),JCN(NA),IA(N+1)の格納状態




**備　考**

a.　NA は行列 $A$ の非零要素の数.

b.　配列 AVAL には, 行列 $A$ の非零要素を第 1 行から順番に格納する.

c.　配列 JCN には, 配列 AVAL に格納した各要素の元の行列 $A$ 上での列番号を格納する.

d.　配列 IA には, 各行の先頭の非零要素の配列 AVAL での位置を格納する.

e.　N $<$ NA を満たさなければならない.

# 付 録 C　　ASL で使用している計算機依存定数

## C.1　誤差判定のための単位

ASL では, 浮動小数点演算における誤差判定のための単位として次の値を設定している. 誤差判定のための単位は, 浮動小数点データの内部表現によって決まる数値であり, ASL ではこの単位を収束判定, 零判定などに用いることがある.

表 C–1　誤差判定のための単位

| 単精度演算 | 倍精度演算 |
|---|---|
| $2^{-23}(\simeq 1.19 \times 10^{-7})$ | $2^{-52}(\simeq 2.22 \times 10^{-16})$ |

**備考** 誤差判定の単位 $\varepsilon$ はマシン $\varepsilon$ と呼ばれることもあり, 通常, 対応する浮動小数点形式で $1+\varepsilon$ の計算結果が 1 と異なるような最小の正の定数として定義される. したがって, 誤差判定の単位を見れば, その浮動小数点形式での (仮数部の) 演算の最大有効桁数がわかる.

## C.2　浮動小数点データの値の最大値・最小値

ASL の内部で定義している浮動小数点データの値の最大値, 最小値を以下に示す.
なお, 以下の最大値, 最小値はハードウェアが実際に採用している浮動小数点形式のそれとは異なる場合があるので注意されたい.

表 C–2　浮動小数点データの値の最大値・最小値

| | 単精度演算 | 倍精度演算 |
|---|---|---|
| 最大値 | $2^{127}(2-2^{-23})$ $(\simeq 3.40 \times 10^{38})$ | $2^{1023}(2-2^{-52})$ $(\simeq 1.80 \times 10^{308})$ |
| 正の最小値 | $2^{-126}$ $(\simeq 1.17 \times 10^{-38})$ | $2^{-1022}$ $(\simeq 2.23 \times 10^{-308})$ |
| 負の最大値 | $-2^{-126}$ $(\simeq -1.17 \times 10^{-38})$ | $-2^{-1022}$ $(\simeq -2.23 \times 10^{-308})$ |
| 最小値 | $-2^{127}(2-2^{-23})$ $(\simeq -3.40 \times 10^{38})$ | $-2^{1023}(2-2^{-52})$ $(\simeq -1.80 \times 10^{308})$ |

# 索 引


CAM1HH : 第 1 分冊, 83
CAM1HM : 第 1 分冊, 80
CAM1MH : 第 1 分冊, 77
CAM1MM : 第 1 分冊, 74
CAN1HH : 第 1 分冊, 95
CAN1HM : 第 1 分冊, 92
CAN1MH : 第 1 分冊, 89
CAN1MM : 第 1 分冊, 86
CANVJ1 : 第 1 分冊, 123
CARGJM : 第 1 分冊, 36
CARSJD : 第 1 分冊, 31
CBGMDI : 第 2 分冊, 71
CBGMLC : 第 2 分冊, 64
CBGMLS : 第 2 分冊, 66
CBGMLU : 第 2 分冊, 62
CBGMLX : 第 2 分冊, 73
CBGMMS : 第 2 分冊, 68
CBGMSL : 第 2 分冊, 58
CBGMSM : 第 2 分冊, 54
CBGNDI : 第 2 分冊, 90
CBGNLC : 第 2 分冊, 83
CBGNLS : 第 2 分冊, 85
CBGNLU : 第 2 分冊, 81
CBGNLX : 第 2 分冊, 92
CBGNMS : 第 2 分冊, 87
CBGNSL : 第 2 分冊, 78
CBGNSM : 第 2 分冊, 75
CBHEDI : 第 2 分冊, 208
CBHELS : 第 2 分冊, 203
CBHELX : 第 2 分冊, 210
CBHEMS : 第 2 分冊, 205
CBHESL : 第 2 分冊, 196
CBHEUC : 第 2 分冊, 201
CBHEUD : 第 2 分冊, 199
CBHFDI : 第 2 分冊, 192
CBHFLS : 第 2 分冊, 187
CBHFLX : 第 2 分冊, 194
CBHFMS : 第 2 分冊, 189
CBHFSL : 第 2 分冊, 179
CBHFUC : 第 2 分冊, 185
CBHFUD : 第 2 分冊, 183
CBHPDI : 第 2 分冊, 158
CBHPLS : 第 2 分冊, 153
CBHPLX : 第 2 分冊, 160
CBHPMS : 第 2 分冊, 155
CBHPSL : 第 2 分冊, 145
CBHPUC : 第 2 分冊, 151
CBHPUD : 第 2 分冊, 149
CBHRDI : 第 2 分冊, 175
CBHRLS : 第 2 分冊, 170
CBHRLX : 第 2 分冊, 177
CBHRMS : 第 2 分冊, 172
CBHRSL : 第 2 分冊, 162
CBHRUC : 第 2 分冊, 168
CBHRUD : 第 2 分冊, 166
CCGEAA : 第 1 分冊, 155
CCGEAN : 第 1 分冊, 158
CCGHAA : 第 1 分冊, 306
CCGHAN : 第 1 分冊, 310
CCGJAA : 第 1 分冊, 312
CCGJAN : 第 1 分冊, 316
CCGKAA : 第 1 分冊, 318
CCGKAN : 第 1 分冊, 322
CCGNAA : 第 1 分冊, 160
CCGNAN : 第 1 分冊, 163
CCGRAA : 第 1 分冊, 300
CCGRAN : 第 1 分冊, 304
CCHEAA : 第 1 分冊, 197
CCHEAN : 第 1 分冊, 200
CCHEEE : 第 1 分冊, 208
CCHEEN : 第 1 分冊, 212
CCHESN : 第 1 分冊, 206
CCHESS : 第 1 分冊, 202
CCHJSS : 第 1 分冊, 258
CCHRAA : 第 1 分冊, 179
CCHRAN : 第 1 分冊, 182
CCHREE : 第 1 分冊, 190
CCHREN : 第 1 分冊, 195

CCHRSN : 第 1 分冊, 188
CCHRSS : 第 1 分冊, 184
CFC1BF : 第 3 分冊, 53
CFC1FB : 第 3 分冊, 50
CFC2BF : 第 3 分冊, 103
CFC2FB : 第 3 分冊, 100
CFC3BF : 第 3 分冊, 128
CFC3FB : 第 3 分冊, 125
CFCMBF : 第 3 分冊, 79
CFCMFB : 第 3 分冊, 76
CIBH1N : 第 5 分冊, 131
CIBH2N : 第 5 分冊, 133
CIBINZ : 第 5 分冊, 118
CIBJNZ : 第 5 分冊, 85
CIBKNZ : 第 5 分冊, 120
CIBYNZ : 第 5 分冊, 87
CIGAMZ : 第 5 分冊, 168
CIGLGZ : 第 5 分冊, 170
CLACHA : 第 5 分冊, 327
CLNCIS : 第 5 分冊, 342

D1CDBN : 第 6 分冊, 71
D1CDBT : 第 6 分冊, 111
D1CDCC : 第 6 分冊, 142
D1CDCH : 第 6 分冊, 75
D1CDEX : 第 6 分冊, 128
D1CDFB : 第 6 分冊, 99
D1CDGM : 第 6 分冊, 105
D1CDGU : 第 6 分冊, 131
D1CDIB : 第 6 分冊, 114
D1CDIC : 第 6 分冊, 78
D1CDIF : 第 6 分冊, 102
D1CDIG : 第 6 分冊, 108
D1CDIN : 第 6 分冊, 68
D1CDIS : 第 6 分冊, 96
D1CDIT : 第 6 分冊, 90
D1CDIX : 第 6 分冊, 84
D1CDLD : 第 6 分冊, 133
D1CDLG : 第 6 分冊, 139
D1CDLN : 第 6 分冊, 136
D1CDNC : 第 6 分冊, 81
D1CDNO : 第 6 分冊, 65
D1CDNT : 第 6 分冊, 93
D1CDPA : 第 6 分冊, 122
D1CDTB : 第 6 分冊, 87
D1CDTR : 第 6 分冊, 119
D1CDUF : 第 6 分冊, 117
D1CDWE : 第 6 分冊, 125
D1DDBP : 第 6 分冊, 145
D1DDGO : 第 6 分冊, 149
D1DDHG : 第 6 分冊, 153
D1DDHN : 第 6 分冊, 156
D1DDPO : 第 6 分冊, 151
D2BA1T : 第 6 分冊, 166
D2BA2S : 第 6 分冊, 171
D2BAGM : 第 6 分冊, 182
D2BAHM : 第 6 分冊, 190
D2BAMO : 第 6 分冊, 186
D2BAMS : 第 6 分冊, 178
D2BASM : 第 6 分冊, 193
D2CCMA : 第 6 分冊, 213
D2CCMT : 第 6 分冊, 208
D2CCPR : 第 6 分冊, 218
D2VCGR : 第 6 分冊, 201
D2VCMT : 第 6 分冊, 196
D3IECD : 第 6 分冊, 291
D3IEME : 第 6 分冊, 278
D3IERA : 第 6 分冊, 275
D3IESR : 第 6 分冊, 295
D3IESU : 第 6 分冊, 281
D3IETC : 第 6 分冊, 288
D3IEVA : 第 6 分冊, 285
D3TSCD : 第 6 分冊, 329
D3TSME : 第 6 分冊, 309
D3TSRA : 第 6 分冊, 300
D3TSRD : 第 6 分冊, 304
D3TSSR : 第 6 分冊, 332
D3TSSU : 第 6 分冊, 314
D3TSTC : 第 6 分冊, 324
D3TSVA : 第 6 分冊, 320
D41WR1 : 第 6 分冊, 345
D42WR1 : 第 6 分冊, 365
D42WRM : 第 6 分冊, 357
D42WRN : 第 6 分冊, 351
D4BI01 : 第 6 分冊, 420
D4GL01 : 第 6 分冊, 416
D4MU01 : 第 6 分冊, 398
D4MWRF : 第 6 分冊, 373
D4MWRM : 第 6 分冊, 385
D4RB01 : 第 6 分冊, 412

D5CHEF : 第 6 分冊, 428
D5CHMD : 第 6 分冊, 437
D5CHMN : 第 6 分冊, 434
D5CHTT : 第 6 分冊, 431
D5TEMH : 第 6 分冊, 447
D5TESG : 第 6 分冊, 440
D5TESP : 第 6 分冊, 451
D5TEWL : 第 6 分冊, 443
D6CLAN : 第 6 分冊, 495
D6CLDA : 第 6 分冊, 499
D6CLDS : 第 6 分冊, 491
D6CPCC : 第 6 分冊, 463
D6CPSC : 第 6 分冊, 465
D6CVAN : 第 6 分冊, 475
D6CVSC : 第 6 分冊, 478
D6DAFN : 第 6 分冊, 482
D6DASC : 第 6 分冊, 485
D6FALD : 第 6 分冊, 469
D6FAVR : 第 6 分冊, 471
DABMCS : 第 1 分冊, 13
DABMEL : 第 1 分冊, 15
DAM1AD : 第 1 分冊, 46
DAM1MM : 第 1 分冊, 62
DAM1MS : 第 1 分冊, 55
DAM1MT : 第 1 分冊, 65
DAM1MU : 第 1 分冊, 52
DAM1SB : 第 1 分冊, 49
DAM1TM : 第 1 分冊, 68
DAM1TP : 第 1 分冊, 107
DAM1TT : 第 1 分冊, 71
DAM1VM : 第 1 分冊, 98
DAM3TP : 第 1 分冊, 109
DAM3VM : 第 1 分冊, 101
DAM4VM : 第 1 分冊, 104
DAMT1M : 第 1 分冊, 58
DAMVJ1 : 第 1 分冊, 112
DAMVJ3 : 第 1 分冊, 115
DAMVJ4 : 第 1 分冊, 119
DARGJM : 第 1 分冊, 26
DARSJD : 第 1 分冊, 21
DASBCS : 第 1 分冊, 17
DASBEL : 第 1 分冊, 19
DATM1M : 第 1 分冊, 60
DBBDDI : 第 2 分冊, 221
DBBDLC : 第 2 分冊, 217
DBBDLS : 第 2 分冊, 219
DBBDLU : 第 2 分冊, 215
DBBDLX : 第 2 分冊, 223
DBBDSL : 第 2 分冊, 212
DBBPDI : 第 2 分冊, 234
DBBPLS : 第 2 分冊, 232
DBBPLX : 第 2 分冊, 236
DBBPSL : 第 2 分冊, 226
DBBPUC : 第 2 分冊, 230
DBBPUU : 第 2 分冊, 229
DBGMDI : 第 2 分冊, 49
DBGMLC : 第 2 分冊, 42
DBGMLS : 第 2 分冊, 44
DBGMLU : 第 2 分冊, 40
DBGMLX : 第 2 分冊, 51
DBGMMS : 第 2 分冊, 46
DBGMSL : 第 2 分冊, 36
DBGMSM : 第 2 分冊, 32
DBPDDI : 第 2 分冊, 102
DBPDLS : 第 2 分冊, 100
DBPDLX : 第 2 分冊, 104
DBPDSL : 第 2 分冊, 94
DBPDUC : 第 2 分冊, 98
DBPDUU : 第 2 分冊, 97
DBSMDI : 第 2 分冊, 134
DBSMLS : 第 2 分冊, 129
DBSMLX : 第 2 分冊, 136
DBSMMS : 第 2 分冊, 131
DBSMSL : 第 2 分冊, 122
DBSMUC : 第 2 分冊, 127
DBSMUD : 第 2 分冊, 125
DBSNLS : 第 2 分冊, 143
DBSNSL : 第 2 分冊, 138
DBSNUD : 第 2 分冊, 141
DBSPDI : 第 2 分冊, 118
DBSPLS : 第 2 分冊, 113
DBSPLX : 第 2 分冊, 120
DBSPMS : 第 2 分冊, 115
DBSPSL : 第 2 分冊, 106
DBSPUC : 第 2 分冊, 111
DBSPUD : 第 2 分冊, 109
DBTDSL : 第 2 分冊, 238
DBTLCO : 第 2 分冊, 275
DBTLDI : 第 2 分冊, 277
DBTLSL : 第 2 分冊, 273

DBTOSL : 第 2 分冊, 256
DBTPSL : 第 2 分冊, 240
DBTSSL : 第 2 分冊, 260
DBTUCO : 第 2 分冊, 269
DBTUDI : 第 2 分冊, 271
DBTUSL : 第 2 分冊, 267
DBVMSL : 第 2 分冊, 263
DCGBFF : 第 1 分冊, 324
DCGEAA : 第 1 分冊, 144
DCGEAN : 第 1 分冊, 148
DCGGAA : 第 1 分冊, 264
DCGGAN : 第 1 分冊, 269
DCGJAA : 第 1 分冊, 288
DCGJAN : 第 1 分冊, 292
DCGKAA : 第 1 分冊, 294
DCGKAN : 第 1 分冊, 298
DCGNAA : 第 1 分冊, 150
DCGNAN : 第 1 分冊, 153
DCGSAA : 第 1 分冊, 271
DCGSAN : 第 1 分冊, 274
DCGSEE : 第 1 分冊, 282
DCGSEN : 第 1 分冊, 286
DCGSSN : 第 1 分冊, 280
DCGSSS : 第 1 分冊, 276
DCSBAA : 第 1 分冊, 214
DCSBAN : 第 1 分冊, 217
DCSBFF : 第 1 分冊, 225
DCSBSN : 第 1 分冊, 223
DCSBSS : 第 1 分冊, 219
DCSJSS : 第 1 分冊, 251
DCSMAA : 第 1 分冊, 164
DCSMAN : 第 1 分冊, 167
DCSMEE : 第 1 分冊, 173
DCSMEN : 第 1 分冊, 177
DCSMSN : 第 1 分冊, 171
DCSMSS : 第 1 分冊, 168
DCSRSS : 第 1 分冊, 245
DCSTAA : 第 1 分冊, 229
DCSTAN : 第 1 分冊, 232
DCSTEE : 第 1 分冊, 239
DCSTEN : 第 1 分冊, 243
DCSTSN : 第 1 分冊, 237
DCSTSS : 第 1 分冊, 233
DFASMA : 第 6 分冊, 242
DFC1BF : 第 3 分冊, 46
DFC1FB : 第 3 分冊, 43
DFC2BF : 第 3 分冊, 96
DFC2FB : 第 3 分冊, 93
DFC3BF : 第 3 分冊, 120
DFC3FB : 第 3 分冊, 116
DFCMBF : 第 3 分冊, 70
DFCMFB : 第 3 分冊, 66
DFCN1D : 第 3 分冊, 143
DFCN2D : 第 3 分冊, 152
DFCN3D : 第 3 分冊, 159
DFCR1D : 第 3 分冊, 169
DFCR2D : 第 3 分冊, 177
DFCR3D : 第 3 分冊, 184
DFCRCS : 第 6 分冊, 240
DFCRCZ : 第 6 分冊, 238
DFCRSC : 第 6 分冊, 236
DFCVCS : 第 6 分冊, 232
DFCVSC : 第 6 分冊, 229
DFDPED : 第 6 分冊, 248
DFDPES : 第 6 分冊, 246
DFDPET : 第 6 分冊, 251
DFLAGE : 第 3 分冊, 225
DFLARA : 第 3 分冊, 220
DFPS1D : 第 3 分冊, 194
DFPS2D : 第 3 分冊, 201
DFPS3D : 第 3 分冊, 208
DFR1BF : 第 3 分冊, 61
DFR1FB : 第 3 分冊, 57
DFR2BF : 第 3 分冊, 111
DFR2FB : 第 3 分冊, 107
DFR3BF : 第 3 分冊, 137
DFR3FB : 第 3 分冊, 133
DFRMBF : 第 3 分冊, 88
DFRMFB : 第 3 分冊, 84
DFWTFF : 第 3 分冊, 250
DFWTFT : 第 3 分冊, 252
DFWTH1 : 第 3 分冊, 228
DFWTH2 : 第 3 分冊, 236
DFWTHI : 第 3 分冊, 242
DFWTHR : 第 3 分冊, 230
DFWTHS : 第 3 分冊, 233
DFWTHT : 第 3 分冊, 239
DFWTMF : 第 3 分冊, 246
DFWTMT : 第 3 分冊, 248
DGICBP : 第 4 分冊, 410

DGICBS : 第 4 分冊, 430
DGICCM : 第 4 分冊, 388
DGICCN : 第 4 分冊, 391
DGICCO : 第 4 分冊, 384
DGICCP : 第 4 分冊, 377
DGICCQ : 第 4 分冊, 378
DGICCR : 第 4 分冊, 380
DGICCS : 第 4 分冊, 382
DGICCT : 第 4 分冊, 386
DGIDBY : 第 4 分冊, 414
DGIDCY : 第 4 分冊, 396
DGIDMC : 第 4 分冊, 360
DGIDPC : 第 4 分冊, 352
DGIDSC : 第 4 分冊, 355
DGIDYB : 第 4 分冊, 403
DGIIBZ : 第 4 分冊, 416
DGIICZ : 第 4 分冊, 398
DGIIMC : 第 4 分冊, 372
DGIIPC : 第 4 分冊, 365
DGIISC : 第 4 分冊, 368
DGIIZB : 第 4 分冊, 407
DGISBX : 第 4 分冊, 412
DGISCX : 第 4 分冊, 394
DGISI1 : 第 4 分冊, 433
DGISI2 : 第 4 分冊, 437
DGISI3 : 第 4 分冊, 444
DGISMC : 第 4 分冊, 347
DGISPC : 第 4 分冊, 339
DGISPO : 第 4 分冊, 418
DGISPR : 第 4 分冊, 421
DGISS1 : 第 4 分冊, 450
DGISS2 : 第 4 分冊, 454
DGISS3 : 第 4 分冊, 462
DGISSC : 第 4 分冊, 342
DGISSO : 第 4 分冊, 424
DGISSR : 第 4 分冊, 427
DGISXB : 第 4 分冊, 400
DH2INT : 第 4 分冊, 245
DHBDFS : 第 4 分冊, 217
DHBSFC : 第 4 分冊, 220
DHEMNH : 第 4 分冊, 223
DHEMNI : 第 4 分冊, 236
DHEMNL : 第 4 分冊, 187
DHNANL : 第 4 分冊, 214
DHNEFL : 第 4 分冊, 196
DHNENH : 第 4 分冊, 229
DHNENL : 第 4 分冊, 206
DHNFML : 第 4 分冊, 257
DHNFNM : 第 4 分冊, 251
DHNIFL : 第 4 分冊, 200
DHNINH : 第 4 分冊, 232
DHNINI : 第 4 分冊, 242
DHNINL : 第 4 分冊, 210
DHNOFH : 第 4 分冊, 226
DHNOFI : 第 4 分冊, 239
DHNOFL : 第 4 分冊, 193
DHNPNL : 第 4 分冊, 203
DHNRML : 第 4 分冊, 254
DHNRNM : 第 4 分冊, 248
DHNSNL : 第 4 分冊, 190
DIBAID : 第 5 分冊, 155
DIBAIX : 第 5 分冊, 151
DIBBEI : 第 5 分冊, 137
DIBBER : 第 5 分冊, 135
DIBBID : 第 5 分冊, 157
DIBBIX : 第 5 分冊, 153
DIBIMX : 第 5 分冊, 112
DIBINX : 第 5 分冊, 108
DIBJMX : 第 5 分冊, 79
DIBJNX : 第 5 分冊, 75
DIBKEI : 第 5 分冊, 141
DIBKER : 第 5 分冊, 139
DIBKMX : 第 5 分冊, 115
DIBKNX : 第 5 分冊, 110
DIBSIN : 第 5 分冊, 127
DIBSJN : 第 5 分冊, 123
DIBSKN : 第 5 分冊, 129
DIBSYN : 第 5 分冊, 125
DIBYMX : 第 5 分冊, 82
DIBYNX : 第 5 分冊, 77
DIEII1 : 第 5 分冊, 180
DIEII2 : 第 5 分冊, 182
DIEII3 : 第 5 分冊, 184
DIEII4 : 第 5 分冊, 186
DIGIG1 : 第 5 分冊, 164
DIGIG2 : 第 5 分冊, 166
DIICOS : 第 5 分冊, 212
DIIERF : 第 5 分冊, 228
DIISIN : 第 5 分冊, 210
DILEG1 : 第 5 分冊, 232

DILEG2 : 第 5 分冊, 235
DIMTCE : 第 5 分冊, 252
DIMTSE : 第 5 分冊, 255
DIOPC2 : 第 5 分冊, 248
DIOPCH : 第 5 分冊, 246
DIOPGL : 第 5 分冊, 250
DIOPHE : 第 5 分冊, 244
DIOPLA : 第 5 分冊, 242
DIOPLE : 第 5 分冊, 237
DIXEPS : 第 5 分冊, 270
DIZBS0 : 第 5 分冊, 90
DIZBS1 : 第 5 分冊, 92
DIZBSL : 第 5 分冊, 98
DIZBSN : 第 5 分冊, 94
DIZBYN : 第 5 分冊, 96
DIZGLW : 第 5 分冊, 239
DJTECC : 第 6 分冊, 32
DJTEEX : 第 6 分冊, 29
DJTEGM : 第 6 分冊, 41
DJTEGU : 第 6 分冊, 35
DJTELG : 第 6 分冊, 44
DJTENO : 第 6 分冊, 26
DJTEUN : 第 6 分冊, 21
DJTEWE : 第 6 分冊, 38
DKFNCS : 第 4 分冊, 66
DKHNCS : 第 4 分冊, 70
DKINCT : 第 4 分冊, 51
DKMNCN : 第 4 分冊, 74
DKSNCA : 第 4 分冊, 45
DKSNCS : 第 4 分冊, 39
DKSSCA : 第 4 分冊, 60
DLARHA : 第 5 分冊, 324
DLNRDS : 第 5 分冊, 330
DLNRIS : 第 5 分冊, 333
DLNRSA : 第 5 分冊, 339
DLNRSS : 第 5 分冊, 336
DLSRDS : 第 5 分冊, 345
DLSRIS : 第 5 分冊, 350
DMCLAF : 第 5 分冊, 407
DMCLCP : 第 5 分冊, 427
DMCLMC : 第 5 分冊, 422
DMCLMZ : 第 5 分冊, 416
DMCLSN : 第 5 分冊, 402
DMCLTP : 第 5 分冊, 433
DMCQAZ : 第 5 分冊, 449
DMCQLM : 第 5 分冊, 444
DMCQSN : 第 5 分冊, 439
DMCUSN : 第 5 分冊, 399
DMSP11 : 第 5 分冊, 467
DMSP1M : 第 5 分冊, 460
DMSPMM : 第 5 分冊, 464
DMSQPM : 第 5 分冊, 455
DMUMQG : 第 5 分冊, 392
DMUMQN : 第 5 分冊, 389
DMUSSN : 第 5 分冊, 396
DMUUSN : 第 5 分冊, 386
DNCBPO : 第 4 分冊, 316
DNDAAO : 第 4 分冊, 296
DNDANL : 第 4 分冊, 302
DNDAPO : 第 4 分冊, 299
DNGAPL : 第 4 分冊, 312
DNLNMA : 第 6 分冊, 525
DNLNRG : 第 6 分冊, 513
DNLNRR : 第 6 分冊, 518
DNNLGF : 第 6 分冊, 535
DNNLPO : 第 6 分冊, 530
DNRAPL : 第 4 分冊, 307
DOFNNF : 第 4 分冊, 98
DOFNNV : 第 4 分冊, 92
DOHNLV : 第 4 分冊, 117
DOHNNF : 第 4 分冊, 111
DOHNNV : 第 4 分冊, 105
DOIEF2 : 第 4 分冊, 127
DOIEV1 : 第 4 分冊, 130
DOLNLV : 第 4 分冊, 123
DOPDH2 : 第 4 分冊, 133
DOPDH3 : 第 4 分冊, 139
DOSNNF : 第 4 分冊, 85
DOSNNV : 第 4 分冊, 79
DPDAPN : 第 4 分冊, 284
DPDOPL : 第 4 分冊, 281
DPGOPL : 第 4 分冊, 293
DPLOPL : 第 4 分冊, 288
DQFODX : 第 4 分冊, 154
DQMOGX : 第 4 分冊, 157
DQMOHX : 第 4 分冊, 160
DQMOJX : 第 4 分冊, 163
DSMGON : 第 5 分冊, 290
DSMGPA : 第 5 分冊, 294
DSSTA1 : 第 5 分冊, 277

DSSTA2 : 第 5 分冊，280
DSSTPT : 第 5 分冊，287
DSSTRA : 第 5 分冊，284
DXA005 : 第 1 分冊，39

GAM1HH : 共有メモリ並列機能編，41
GAM1HM : 共有メモリ並列機能編，37
GAM1MH : 共有メモリ並列機能編，33
GAM1MM : 共有メモリ並列機能編，29
GAN1HH : 共有メモリ並列機能編，54
GAN1HM : 共有メモリ並列機能編，51
GAN1MH : 共有メモリ並列機能編，48
GAN1MM : 共有メモリ並列機能編，45
GBHESL : 共有メモリ並列機能編，126
GBHEUD : 共有メモリ並列機能編，130
GBHFSL : 共有メモリ並列機能編，120
GBHFUD : 共有メモリ並列機能編，124
GBHPSL : 共有メモリ並列機能編，108
GBHPUD : 共有メモリ並列機能編，112
GBHRSL : 共有メモリ並列機能編，114
GBHRUD : 共有メモリ並列機能編，118
GCGJAA : 共有メモリ並列機能編，244
GCGJAN : 共有メモリ並列機能編，248
GCGKAA : 共有メモリ並列機能編，250
GCGKAN : 共有メモリ並列機能編，254
GCGRAA : 共有メモリ並列機能編，238
GCGRAN : 共有メモリ並列機能編，242
GCHEAA : 共有メモリ並列機能編，202
GCHEAN : 共有メモリ並列機能編，206
GCHESN : 共有メモリ並列機能編，212
GCHESS : 共有メモリ並列機能編，208
GCHRAA : 共有メモリ並列機能編，189
GCHRAN : 共有メモリ並列機能編，193
GCHRSN : 共有メモリ並列機能編，200
GCHRSS : 共有メモリ並列機能編，195
GFC2BF : 共有メモリ並列機能編，301
GFC2FB : 共有メモリ並列機能編，298
GFC3BF : 共有メモリ並列機能編，325
GFC3FB : 共有メモリ並列機能編，322
GFCMBF : 共有メモリ並列機能編，276
GFCMFB : 共有メモリ並列機能編，272

HAM1HH : 共有メモリ並列機能編，41
HAM1HM : 共有メモリ並列機能編，37
HAM1MH : 共有メモリ並列機能編，33
HAM1MM : 共有メモリ並列機能編，29
HAN1HH : 共有メモリ並列機能編，54
HAN1HM : 共有メモリ並列機能編，51
HAN1MH : 共有メモリ並列機能編，48
HAN1MM : 共有メモリ並列機能編，45
HBGMLC : 共有メモリ並列機能編，86
HBGMLU : 共有メモリ並列機能編，84
HBGMSL : 共有メモリ並列機能編，80
HBGMSM : 共有メモリ並列機能編，76
HBGNLC : 共有メモリ並列機能編，96
HBGNLU : 共有メモリ並列機能編，94
HBGNSL : 共有メモリ並列機能編，91
HBGNSM : 共有メモリ並列機能編，88
HBHESL : 共有メモリ並列機能編，126
HBHEUD : 共有メモリ並列機能編，130
HBHFSL : 共有メモリ並列機能編，120
HBHFUD : 共有メモリ並列機能編，124
HBHPSL : 共有メモリ並列機能編，108
HBHPUD : 共有メモリ並列機能編，112
HBHRSL : 共有メモリ並列機能編，114
HBHRUD : 共有メモリ並列機能編，118
HCGJAA : 共有メモリ並列機能編，244
HCGJAN : 共有メモリ並列機能編，248
HCGKAA : 共有メモリ並列機能編，250
HCGKAN : 共有メモリ並列機能編，254
HCGRAA : 共有メモリ並列機能編，238
HCGRAN : 共有メモリ並列機能編，242
HCHEAA : 共有メモリ並列機能編，202
HCHEAN : 共有メモリ並列機能編，206
HCHESN : 共有メモリ並列機能編，212
HCHESS : 共有メモリ並列機能編，208
HCHRAA : 共有メモリ並列機能編，189
HCHRAN : 共有メモリ並列機能編，193
HCHRSN : 共有メモリ並列機能編，200
HCHRSS : 共有メモリ並列機能編，195
HFC2BF : 共有メモリ並列機能編，301
HFC2FB : 共有メモリ並列機能編，298
HFC3BF : 共有メモリ並列機能編，325
HFC3FB : 共有メモリ並列機能編，322
HFCMBF : 共有メモリ並列機能編，276
HFCMFB : 共有メモリ並列機能編，272

IIIERF : 第 5 分冊，230

JIIERF : 第 5 分冊，230

PAM1MM : 共有メモリ並列機能編，17

PAM1MT : 共有メモリ並列機能編, 20
PAM1MU : 共有メモリ並列機能編, 14
PAM1TM : 共有メモリ並列機能編, 23
PAM1TT : 共有メモリ並列機能編, 26
PBSNSL : 共有メモリ並列機能編, 103
PBSNUD : 共有メモリ並列機能編, 106
PBSPSL : 共有メモリ並列機能編, 98
PBSPUD : 共有メモリ並列機能編, 101
PCGJAA : 共有メモリ並列機能編, 226
PCGJAN : 共有メモリ並列機能編, 230
PCGKAA : 共有メモリ並列機能編, 232
PCGKAN : 共有メモリ並列機能編, 236
PCGSAA : 共有メモリ並列機能編, 214
PCGSAN : 共有メモリ並列機能編, 217
PCGSSN : 共有メモリ並列機能編, 224
PCGSSS : 共有メモリ並列機能編, 219
PCSMAA : 共有メモリ並列機能編, 179
PCSMAN : 共有メモリ並列機能編, 182
PCSMSN : 共有メモリ並列機能編, 187
PCSMSS : 共有メモリ並列機能編, 184
PFC2BF : 共有メモリ並列機能編, 294
PFC2FB : 共有メモリ並列機能編, 291
PFC3BF : 共有メモリ並列機能編, 317
PFC3FB : 共有メモリ並列機能編, 314
PFCMBF : 共有メモリ並列機能編, 266
PFCMFB : 共有メモリ並列機能編, 262
PFCN2D : 共有メモリ並列機能編, 339
PFCN3D : 共有メモリ並列機能編, 346
PFCR2D : 共有メモリ並列機能編, 354
PFCR3D : 共有メモリ並列機能編, 361
PFPS2D : 共有メモリ並列機能編, 370
PFPS3D : 共有メモリ並列機能編, 377
PFR2BF : 共有メモリ並列機能編, 309
PFR2FB : 共有メモリ並列機能編, 305
PFR3BF : 共有メモリ並列機能編, 334
PFR3FB : 共有メモリ並列機能編, 330
PFRMBF : 共有メモリ並列機能編, 285
PFRMFB : 共有メモリ並列機能編, 281
PSSTA1 : 共有メモリ並列機能編, 393
PSSTA2 : 共有メモリ並列機能編, 396
PXE010 : 共有メモリ並列機能編, 143
PXE020 : 共有メモリ並列機能編, 150
PXE030 : 共有メモリ並列機能編, 157
PXE040 : 共有メモリ並列機能編, 164

QAM1MM : 共有メモリ並列機能編, 17
QAM1MT : 共有メモリ並列機能編, 20
QAM1MU : 共有メモリ並列機能編, 14
QAM1TM : 共有メモリ並列機能編, 23
QAM1TT : 共有メモリ並列機能編, 26
QBGMLC : 共有メモリ並列機能編, 74
QBGMLU : 共有メモリ並列機能編, 72
QBGMSL : 共有メモリ並列機能編, 68
QBGMSM : 共有メモリ並列機能編, 65
QBSNSL : 共有メモリ並列機能編, 103
QBSNUD : 共有メモリ並列機能編, 106
QBSPSL : 共有メモリ並列機能編, 98
QBSPUD : 共有メモリ並列機能編, 101
QCGJAA : 共有メモリ並列機能編, 226
QCGJAN : 共有メモリ並列機能編, 230
QCGKAA : 共有メモリ並列機能編, 232
QCGKAN : 共有メモリ並列機能編, 236
QCGSAA : 共有メモリ並列機能編, 214
QCGSAN : 共有メモリ並列機能編, 217
QCGSSN : 共有メモリ並列機能編, 224
QCGSSS : 共有メモリ並列機能編, 219
QCSMAA : 共有メモリ並列機能編, 179
QCSMAN : 共有メモリ並列機能編, 182
QCSMSN : 共有メモリ並列機能編, 187
QCSMSS : 共有メモリ並列機能編, 184
QFC2BF : 共有メモリ並列機能編, 294
QFC2FB : 共有メモリ並列機能編, 291
QFC3BF : 共有メモリ並列機能編, 317
QFC3FB : 共有メモリ並列機能編, 314
QFCMBF : 共有メモリ並列機能編, 266
QFCMFB : 共有メモリ並列機能編, 262
QFCN2D : 共有メモリ並列機能編, 339
QFCN3D : 共有メモリ並列機能編, 346
QFCR2D : 共有メモリ並列機能編, 354
QFCR3D : 共有メモリ並列機能編, 361
QFPS2D : 共有メモリ並列機能編, 370
QFPS3D : 共有メモリ並列機能編, 377
QFR2BF : 共有メモリ並列機能編, 309
QFR2FB : 共有メモリ並列機能編, 305
QFR3BF : 共有メモリ並列機能編, 334
QFR3FB : 共有メモリ並列機能編, 330
QFRMBF : 共有メモリ並列機能編, 285
QFRMFB : 共有メモリ並列機能編, 281
QSSTA1 : 共有メモリ並列機能編, 393
QSSTA2 : 共有メモリ並列機能編, 396
QXE010 : 共有メモリ並列機能編, 143

QXE020 : 共有メモリ並列機能編, 150
QXE030 : 共有メモリ並列機能編, 157
QXE040 : 共有メモリ並列機能編, 164

R1CDBN : 第 6 分冊, 71
R1CDBT : 第 6 分冊, 111
R1CDCC : 第 6 分冊, 142
R1CDCH : 第 6 分冊, 75
R1CDEX : 第 6 分冊, 128
R1CDFB : 第 6 分冊, 99
R1CDGM : 第 6 分冊, 105
R1CDGU : 第 6 分冊, 131
R1CDIB : 第 6 分冊, 114
R1CDIC : 第 6 分冊, 78
R1CDIF : 第 6 分冊, 102
R1CDIG : 第 6 分冊, 108
R1CDIN : 第 6 分冊, 68
R1CDIS : 第 6 分冊, 96
R1CDIT : 第 6 分冊, 90
R1CDIX : 第 6 分冊, 84
R1CDLD : 第 6 分冊, 133
R1CDLG : 第 6 分冊, 139
R1CDLN : 第 6 分冊, 136
R1CDNC : 第 6 分冊, 81
R1CDNO : 第 6 分冊, 65
R1CDNT : 第 6 分冊, 93
R1CDPA : 第 6 分冊, 122
R1CDTB : 第 6 分冊, 87
R1CDTR : 第 6 分冊, 119
R1CDUF : 第 6 分冊, 117
R1CDWE : 第 6 分冊, 125
R1DDBP : 第 6 分冊, 145
R1DDGO : 第 6 分冊, 149
R1DDHG : 第 6 分冊, 153
R1DDHN : 第 6 分冊, 156
R1DDPO : 第 6 分冊, 151
R2BA1T : 第 6 分冊, 166
R2BA2S : 第 6 分冊, 171
R2BAGM : 第 6 分冊, 182
R2BAHM : 第 6 分冊, 190
R2BAMO : 第 6 分冊, 186
R2BAMS : 第 6 分冊, 178
R2BASM : 第 6 分冊, 193
R2CCMA : 第 6 分冊, 213
R2CCMT : 第 6 分冊, 208
R2CCPR : 第 6 分冊, 218
R2VCGR : 第 6 分冊, 201
R2VCMT : 第 6 分冊, 196
R3IECD : 第 6 分冊, 291
R3IEME : 第 6 分冊, 278
R3IERA : 第 6 分冊, 275
R3IESR : 第 6 分冊, 295
R3IESU : 第 6 分冊, 281
R3IETC : 第 6 分冊, 288
R3IEVA : 第 6 分冊, 285
R3TSCD : 第 6 分冊, 329
R3TSME : 第 6 分冊, 309
R3TSRA : 第 6 分冊, 300
R3TSRD : 第 6 分冊, 304
R3TSSR : 第 6 分冊, 332
R3TSSU : 第 6 分冊, 314
R3TSTC : 第 6 分冊, 324
R3TSVA : 第 6 分冊, 320
R41WR1 : 第 6 分冊, 345
R42WR1 : 第 6 分冊, 365
R42WRM : 第 6 分冊, 357
R42WRN : 第 6 分冊, 351
R4BI01 : 第 6 分冊, 420
R4GL01 : 第 6 分冊, 416
R4MU01 : 第 6 分冊, 398
R4MWRF : 第 6 分冊, 373
R4MWRM : 第 6 分冊, 385
R4RB01 : 第 6 分冊, 412
R5CHEF : 第 6 分冊, 428
R5CHMD : 第 6 分冊, 437
R5CHMN : 第 6 分冊, 434
R5CHTT : 第 6 分冊, 431
R5TEMH : 第 6 分冊, 447
R5TESG : 第 6 分冊, 440
R5TESP : 第 6 分冊, 451
R5TEWL : 第 6 分冊, 443
R6CLAN : 第 6 分冊, 495
R6CLDA : 第 6 分冊, 499
R6CLDS : 第 6 分冊, 491
R6CPCC : 第 6 分冊, 463
R6CPSC : 第 6 分冊, 465
R6CVAN : 第 6 分冊, 475
R6CVSC : 第 6 分冊, 478
R6DAFN : 第 6 分冊, 482
R6DASC : 第 6 分冊, 485

R6FALD : 第 6 分冊, 469
R6FAVR : 第 6 分冊, 471
RABMCS : 第 1 分冊, 13
RABMEL : 第 1 分冊, 15
RAM1AD : 第 1 分冊, 46
RAM1MM : 第 1 分冊, 62
RAM1MS : 第 1 分冊, 55
RAM1MT : 第 1 分冊, 65
RAM1MU : 第 1 分冊, 52
RAM1SB : 第 1 分冊, 49
RAM1TM : 第 1 分冊, 68
RAM1TP : 第 1 分冊, 107
RAM1TT : 第 1 分冊, 71
RAM1VM : 第 1 分冊, 98
RAM3TP : 第 1 分冊, 109
RAM3VM : 第 1 分冊, 101
RAM4VM : 第 1 分冊, 104
RAMT1M : 第 1 分冊, 58
RAMVJ1 : 第 1 分冊, 112
RAMVJ3 : 第 1 分冊, 115
RAMVJ4 : 第 1 分冊, 119
RARGJM : 第 1 分冊, 26
RARSJD : 第 1 分冊, 21
RASBCS : 第 1 分冊, 17
RASBEL : 第 1 分冊, 19
RATM1M : 第 1 分冊, 60
RBBDDI : 第 2 分冊, 221
RBBDLC : 第 2 分冊, 217
RBBDLS : 第 2 分冊, 219
RBBDLU : 第 2 分冊, 215
RBBDLX : 第 2 分冊, 223
RBBDSL : 第 2 分冊, 212
RBBPDI : 第 2 分冊, 234
RBBPLS : 第 2 分冊, 232
RBBPLX : 第 2 分冊, 236
RBBPSL : 第 2 分冊, 226
RBBPUC : 第 2 分冊, 230
RBBPUU : 第 2 分冊, 229
RBGMDI : 第 2 分冊, 49
RBGMLC : 第 2 分冊, 42
RBGMLS : 第 2 分冊, 44
RBGMLU : 第 2 分冊, 40
RBGMLX : 第 2 分冊, 51
RBGMMS : 第 2 分冊, 46
RBGMSL : 第 2 分冊, 36
RBGMSM : 第 2 分冊, 32
RBPDDI : 第 2 分冊, 102
RBPDLS : 第 2 分冊, 100
RBPDLX : 第 2 分冊, 104
RBPDSL : 第 2 分冊, 94
RBPDUC : 第 2 分冊, 98
RBPDUU : 第 2 分冊, 97
RBSMDI : 第 2 分冊, 134
RBSMLS : 第 2 分冊, 129
RBSMLX : 第 2 分冊, 136
RBSMMS : 第 2 分冊, 131
RBSMSL : 第 2 分冊, 122
RBSMUC : 第 2 分冊, 127
RBSMUD : 第 2 分冊, 125
RBSNLS : 第 2 分冊, 143
RBSNSL : 第 2 分冊, 138
RBSNUD : 第 2 分冊, 141
RBSPDI : 第 2 分冊, 118
RBSPLS : 第 2 分冊, 113
RBSPLX : 第 2 分冊, 120
RBSPMS : 第 2 分冊, 115
RBSPSL : 第 2 分冊, 106
RBSPUC : 第 2 分冊, 111
RBSPUD : 第 2 分冊, 109
RBTDSL : 第 2 分冊, 238
RBTLCO : 第 2 分冊, 275
RBTLDI : 第 2 分冊, 277
RBTLSL : 第 2 分冊, 273
RBTOSL : 第 2 分冊, 256
RBTPSL : 第 2 分冊, 240
RBTSSL : 第 2 分冊, 260
RBTUCO : 第 2 分冊, 269
RBTUDI : 第 2 分冊, 271
RBTUSL : 第 2 分冊, 267
RBVMSL : 第 2 分冊, 263
RCGBFF : 第 1 分冊, 324
RCGEAA : 第 1 分冊, 144
RCGEAN : 第 1 分冊, 148
RCGGAA : 第 1 分冊, 264
RCGGAN : 第 1 分冊, 269
RCGJAA : 第 1 分冊, 288
RCGJAN : 第 1 分冊, 292
RCGKAA : 第 1 分冊, 294
RCGKAN : 第 1 分冊, 298
RCGNAA : 第 1 分冊, 150

RCGNAN : 第 1 分冊, 153
RCGSAA : 第 1 分冊, 271
RCGSAN : 第 1 分冊, 274
RCGSEE : 第 1 分冊, 282
RCGSEN : 第 1 分冊, 286
RCGSSN : 第 1 分冊, 280
RCGSSS : 第 1 分冊, 276
RCSBAA : 第 1 分冊, 214
RCSBAN : 第 1 分冊, 217
RCSBFF : 第 1 分冊, 225
RCSBSN : 第 1 分冊, 223
RCSBSS : 第 1 分冊, 219
RCSJSS : 第 1 分冊, 251
RCSMAA : 第 1 分冊, 164
RCSMAN : 第 1 分冊, 167
RCSMEE : 第 1 分冊, 173
RCSMEN : 第 1 分冊, 177
RCSMSN : 第 1 分冊, 171
RCSMSS : 第 1 分冊, 168
RCSRSS : 第 1 分冊, 245
RCSTAA : 第 1 分冊, 229
RCSTAN : 第 1 分冊, 232
RCSTEE : 第 1 分冊, 239
RCSTEN : 第 1 分冊, 243
RCSTSN : 第 1 分冊, 237
RCSTSS : 第 1 分冊, 233
RFASMA : 第 6 分冊, 242
RFC1BF : 第 3 分冊, 46
RFC1FB : 第 3 分冊, 43
RFC2BF : 第 3 分冊, 96
RFC2FB : 第 3 分冊, 93
RFC3BF : 第 3 分冊, 120
RFC3FB : 第 3 分冊, 116
RFCMBF : 第 3 分冊, 70
RFCMFB : 第 3 分冊, 66
RFCN1D : 第 3 分冊, 143
RFCN2D : 第 3 分冊, 152
RFCN3D : 第 3 分冊, 159
RFCR1D : 第 3 分冊, 169
RFCR2D : 第 3 分冊, 177
RFCR3D : 第 3 分冊, 184
RFCRCS : 第 6 分冊, 240
RFCRCZ : 第 6 分冊, 238
RFCRSC : 第 6 分冊, 236
RFCVCS : 第 6 分冊, 232
RFCVSC : 第 6 分冊, 229
RFDPED : 第 6 分冊, 248
RFDPES : 第 6 分冊, 246
RFDPET : 第 6 分冊, 251
RFLAGE : 第 3 分冊, 225
RFLARA : 第 3 分冊, 220
RFPS1D : 第 3 分冊, 194
RFPS2D : 第 3 分冊, 201
RFPS3D : 第 3 分冊, 208
RFR1BF : 第 3 分冊, 61
RFR1FB : 第 3 分冊, 57
RFR2BF : 第 3 分冊, 111
RFR2FB : 第 3 分冊, 107
RFR3BF : 第 3 分冊, 137
RFR3FB : 第 3 分冊, 133
RFRMBF : 第 3 分冊, 88
RFRMFB : 第 3 分冊, 84
RFWTFF : 第 3 分冊, 250
RFWTFT : 第 3 分冊, 252
RFWTH1 : 第 3 分冊, 228
RFWTH2 : 第 3 分冊, 236
RFWTHI : 第 3 分冊, 242
RFWTHR : 第 3 分冊, 230
RFWTHS : 第 3 分冊, 233
RFWTHT : 第 3 分冊, 239
RFWTMF : 第 3 分冊, 246
RFWTMT : 第 3 分冊, 248
RGICBP : 第 4 分冊, 410
RGICBS : 第 4 分冊, 430
RGICCM : 第 4 分冊, 388
RGICCN : 第 4 分冊, 391
RGICCO : 第 4 分冊, 384
RGICCP : 第 4 分冊, 377
RGICCQ : 第 4 分冊, 378
RGICCR : 第 4 分冊, 380
RGICCS : 第 4 分冊, 382
RGICCT : 第 4 分冊, 386
RGIDBY : 第 4 分冊, 414
RGIDCY : 第 4 分冊, 396
RGIDMC : 第 4 分冊, 360
RGIDPC : 第 4 分冊, 352
RGIDSC : 第 4 分冊, 355
RGIDYB : 第 4 分冊, 403
RGIIBZ : 第 4 分冊, 416
RGIICZ : 第 4 分冊, 398

RGIIMC : 第 4 分冊, 372
RGIIPC : 第 4 分冊, 365
RGIISC : 第 4 分冊, 368
RGIIZB : 第 4 分冊, 407
RGISBX : 第 4 分冊, 412
RGISCX : 第 4 分冊, 394
RGISI1 : 第 4 分冊, 433
RGISI2 : 第 4 分冊, 437
RGISI3 : 第 4 分冊, 444
RGISMC : 第 4 分冊, 347
RGISPC : 第 4 分冊, 339
RGISPO : 第 4 分冊, 418
RGISPR : 第 4 分冊, 421
RGISS1 : 第 4 分冊, 450
RGISS2 : 第 4 分冊, 454
RGISS3 : 第 4 分冊, 462
RGISSC : 第 4 分冊, 342
RGISSO : 第 4 分冊, 424
RGISSR : 第 4 分冊, 427
RGISXB : 第 4 分冊, 400
RH2INT : 第 4 分冊, 245
RHBDFS : 第 4 分冊, 217
RHBSFC : 第 4 分冊, 220
RHEMNH : 第 4 分冊, 223
RHEMNI : 第 4 分冊, 236
RHEMNL : 第 4 分冊, 187
RHNANL : 第 4 分冊, 214
RHNEFL : 第 4 分冊, 196
RHNENH : 第 4 分冊, 229
RHNENL : 第 4 分冊, 206
RHNFML : 第 4 分冊, 257
RHNFNM : 第 4 分冊, 251
RHNIFL : 第 4 分冊, 200
RHNINH : 第 4 分冊, 232
RHNINI : 第 4 分冊, 242
RHNINL : 第 4 分冊, 210
RHNOFH : 第 4 分冊, 226
RHNOFI : 第 4 分冊, 239
RHNOFL : 第 4 分冊, 193
RHNPNL : 第 4 分冊, 203
RHNRML : 第 4 分冊, 254
RHNRNM : 第 4 分冊, 248
RHNSNL : 第 4 分冊, 190
RIBAID : 第 5 分冊, 155
RIBAIX : 第 5 分冊, 151
RIBBEI : 第 5 分冊, 137
RIBBER : 第 5 分冊, 135
RIBBID : 第 5 分冊, 157
RIBBIX : 第 5 分冊, 153
RIBIMX : 第 5 分冊, 112
RIBINX : 第 5 分冊, 108
RIBJMX : 第 5 分冊, 79
RIBJNX : 第 5 分冊, 75
RIBKEI : 第 5 分冊, 141
RIBKER : 第 5 分冊, 139
RIBKMX : 第 5 分冊, 115
RIBKNX : 第 5 分冊, 110
RIBSIN : 第 5 分冊, 127
RIBSJN : 第 5 分冊, 123
RIBSKN : 第 5 分冊, 129
RIBSYN : 第 5 分冊, 125
RIBYMX : 第 5 分冊, 82
RIBYNX : 第 5 分冊, 77
RIEII1 : 第 5 分冊, 180
RIEII2 : 第 5 分冊, 182
RIEII3 : 第 5 分冊, 184
RIEII4 : 第 5 分冊, 186
RIGIG1 : 第 5 分冊, 164
RIGIG2 : 第 5 分冊, 166
RIICOS : 第 5 分冊, 212
RIIERF : 第 5 分冊, 228
RIISIN : 第 5 分冊, 210
RILEG1 : 第 5 分冊, 232
RILEG2 : 第 5 分冊, 235
RIMTCE : 第 5 分冊, 252
RIMTSE : 第 5 分冊, 255
RIOPC2 : 第 5 分冊, 248
RIOPCH : 第 5 分冊, 246
RIOPGL : 第 5 分冊, 250
RIOPHE : 第 5 分冊, 244
RIOPLA : 第 5 分冊, 242
RIOPLE : 第 5 分冊, 237
RIXEPS : 第 5 分冊, 270
RIZBS0 : 第 5 分冊, 90
RIZBS1 : 第 5 分冊, 92
RIZBSL : 第 5 分冊, 98
RIZBSN : 第 5 分冊, 94
RIZBYN : 第 5 分冊, 96
RIZGLW : 第 5 分冊, 239
RJTEBI : 第 6 分冊, 47

RJTECC : 第 6 分冊, 32
RJTEEX : 第 6 分冊, 29
RJTEGM : 第 6 分冊, 41
RJTEGU : 第 6 分冊, 35
RJTELG : 第 6 分冊, 44
RJTENG : 第 6 分冊, 50
RJTENO : 第 6 分冊, 26
RJTEPO : 第 6 分冊, 53
RJTEUN : 第 6 分冊, 21
RJTEWE : 第 6 分冊, 38
RKFNCS : 第 4 分冊, 66
RKHNCS : 第 4 分冊, 70
RKINCT : 第 4 分冊, 51
RKMNCN : 第 4 分冊, 74
RKSNCA : 第 4 分冊, 45
RKSNCS : 第 4 分冊, 39
RKSSCA : 第 4 分冊, 60
RLARHA : 第 5 分冊, 324
RLNRDS : 第 5 分冊, 330
RLNRIS : 第 5 分冊, 333
RLNRSA : 第 5 分冊, 339
RLNRSS : 第 5 分冊, 336
RLSRDS : 第 5 分冊, 345
RLSRIS : 第 5 分冊, 350
RMCLAF : 第 5 分冊, 407
RMCLCP : 第 5 分冊, 427
RMCLMC : 第 5 分冊, 422
RMCLMZ : 第 5 分冊, 416
RMCLSN : 第 5 分冊, 402
RMCLTP : 第 5 分冊, 433
RMCQAZ : 第 5 分冊, 449
RMCQLM : 第 5 分冊, 444
RMCQSN : 第 5 分冊, 439
RMCUSN : 第 5 分冊, 399
RMSP11 : 第 5 分冊, 467
RMSP1M : 第 5 分冊, 460
RMSPMM : 第 5 分冊, 464
RMSQPM : 第 5 分冊, 455
RMUMQG : 第 5 分冊, 392
RMUMQN : 第 5 分冊, 389
RMUSSN : 第 5 分冊, 396
RMUUSN : 第 5 分冊, 386
RNCBPO : 第 4 分冊, 316
RNDAAO : 第 4 分冊, 296
RNDANL : 第 4 分冊, 302
RNDAPO : 第 4 分冊, 299
RNGAPL : 第 4 分冊, 312
RNLNMA : 第 6 分冊, 525
RNLNRG : 第 6 分冊, 513
RNLNRR : 第 6 分冊, 518
RNNLGF : 第 6 分冊, 535
RNRAPL : 第 4 分冊, 307
ROFNNF : 第 4 分冊, 98
ROFNNV : 第 4 分冊, 92
ROHNLV : 第 4 分冊, 117
ROHNNF : 第 4 分冊, 111
ROHNNV : 第 4 分冊, 105
ROIEF2 : 第 4 分冊, 127
ROIEV1 : 第 4 分冊, 130
ROLNLV : 第 4 分冊, 123
ROPDH2 : 第 4 分冊, 133
ROPDH3 : 第 4 分冊, 139
ROSNNF : 第 4 分冊, 85
ROSNNV : 第 4 分冊, 79
RPDAPN : 第 4 分冊, 284
RPDOPL : 第 4 分冊, 281
RPGOPL : 第 4 分冊, 293
RPLOPL : 第 4 分冊, 288
RQFODX : 第 4 分冊, 154
RQMOGX : 第 4 分冊, 157
RQMOHX : 第 4 分冊, 160
RQMOJX : 第 4 分冊, 163
RSMGON : 第 5 分冊, 290
RSMGPA : 第 5 分冊, 294
RSSTA1 : 第 5 分冊, 277
RSSTA2 : 第 5 分冊, 280
RSSTPT : 第 5 分冊, 287
RSSTRA : 第 5 分冊, 284
RXA005 : 第 1 分冊, 39

VIBH0X : 第 5 分冊, 143
VIBH1X : 第 5 分冊, 145
VIBHY0 : 第 5 分冊, 147
VIBHY1 : 第 5 分冊, 149
VIBI0X : 第 5 分冊, 100
VIBI1X : 第 5 分冊, 104
VIBJ0X : 第 5 分冊, 67
VIBJ1X : 第 5 分冊, 71
VIBK0X : 第 5 分冊, 102
VIBK1X : 第 5 分冊, 106

VIBY0X : 第 5 分冊, 69
VIBY1X : 第 5 分冊, 73
VIDBEY : 第 5 分冊, 261
VIECI1 : 第 5 分冊, 176
VIECI2 : 第 5 分冊, 178
VIEJAC : 第 5 分冊, 188
VIEJEP : 第 5 分冊, 198
VIEJTE : 第 5 分冊, 200
VIEJZT : 第 5 分冊, 196
VIENMQ : 第 5 分冊, 190
VIEPAI : 第 5 分冊, 202
VIERFC : 第 5 分冊, 226
VIERRF : 第 5 分冊, 224
VIETHE : 第 5 分冊, 193
VIGAMX : 第 5 分冊, 159
VIGBET : 第 5 分冊, 174
VIGDIG : 第 5 分冊, 172
VIGLGX : 第 5 分冊, 162
VIICNC : 第 5 分冊, 222
VIICND : 第 5 分冊, 220
VIIDAW : 第 5 分冊, 218
VIIEXP : 第 5 分冊, 205
VIIFCO : 第 5 分冊, 216
VIIFSI : 第 5 分冊, 214
VIILOG : 第 5 分冊, 208
VINPLG : 第 5 分冊, 263
VIXSLA : 第 5 分冊, 266
VIXSPS : 第 5 分冊, 258
VIXZTA : 第 5 分冊, 268

WBTCLS : 第 2 分冊, 252
WBTCSL : 第 2 分冊, 249
WBTDLS : 第 2 分冊, 246
WBTDSL : 第 2 分冊, 243
WIBH0X : 第 5 分冊, 143
WIBH1X : 第 5 分冊, 145
WIBHY0 : 第 5 分冊, 147
WIBHY1 : 第 5 分冊, 149
WIBI0X : 第 5 分冊, 100
WIBI1X : 第 5 分冊, 104
WIBJ0X : 第 5 分冊, 67
WIBJ1X : 第 5 分冊, 71
WIBK0X : 第 5 分冊, 102
WIBK1X : 第 5 分冊, 106
WIBY0X : 第 5 分冊, 69
WIBY1X : 第 5 分冊, 73
WIDBEY : 第 5 分冊, 261
WIECI1 : 第 5 分冊, 176
WIECI2 : 第 5 分冊, 178
WIEJAC : 第 5 分冊, 188
WIEJEP : 第 5 分冊, 198
WIEJTE : 第 5 分冊, 200
WIEJZT : 第 5 分冊, 196
WIENMQ : 第 5 分冊, 190
WIEPAI : 第 5 分冊, 202
WIERFC : 第 5 分冊, 226
WIERRF : 第 5 分冊, 224
WIETHE : 第 5 分冊, 193
WIGAMX : 第 5 分冊, 159
WIGBET : 第 5 分冊, 174
WIGDIG : 第 5 分冊, 172
WIGLGX : 第 5 分冊, 162
WIICNC : 第 5 分冊, 222
WIICND : 第 5 分冊, 220
WIIDAW : 第 5 分冊, 218
WIIEXP : 第 5 分冊, 205
WIIFCO : 第 5 分冊, 216
WIIFSI : 第 5 分冊, 214
WIILOG : 第 5 分冊, 208
WINPLG : 第 5 分冊, 263
WIXSLA : 第 5 分冊, 266
WIXSPS : 第 5 分冊, 258
WIXZTA : 第 5 分冊, 268

ZAM1HH : 第 1 分冊, 83
ZAM1HM : 第 1 分冊, 80
ZAM1MH : 第 1 分冊, 77
ZAM1MM : 第 1 分冊, 74
ZAN1HH : 第 1 分冊, 95
ZAN1HM : 第 1 分冊, 92
ZAN1MH : 第 1 分冊, 89
ZAN1MM : 第 1 分冊, 86
ZANVJ1 : 第 1 分冊, 123
ZARGJM : 第 1 分冊, 36
ZARSJD : 第 1 分冊, 31
ZBGMDI : 第 2 分冊, 71
ZBGMLC : 第 2 分冊, 64
ZBGMLS : 第 2 分冊, 66
ZBGMLU : 第 2 分冊, 62
ZBGMLX : 第 2 分冊, 73

ZBGMMS : 第 2 分冊, 68
ZBGMSL : 第 2 分冊, 58
ZBGMSM : 第 2 分冊, 54
ZBGNDI : 第 2 分冊, 90
ZBGNLC : 第 2 分冊, 83
ZBGNLS : 第 2 分冊, 85
ZBGNLU : 第 2 分冊, 81
ZBGNLX : 第 2 分冊, 92
ZBGNMS : 第 2 分冊, 87
ZBGNSL : 第 2 分冊, 78
ZBGNSM : 第 2 分冊, 75
ZBHEDI : 第 2 分冊, 208
ZBHELS : 第 2 分冊, 203
ZBHELX : 第 2 分冊, 210
ZBHEMS : 第 2 分冊, 205
ZBHESL : 第 2 分冊, 196
ZBHEUC : 第 2 分冊, 201
ZBHEUD : 第 2 分冊, 199
ZBHFDI : 第 2 分冊, 192
ZBHFLS : 第 2 分冊, 187
ZBHFLX : 第 2 分冊, 194
ZBHFMS : 第 2 分冊, 189
ZBHFSL : 第 2 分冊, 179
ZBHFUC : 第 2 分冊, 185
ZBHFUD : 第 2 分冊, 183
ZBHPDI : 第 2 分冊, 158
ZBHPLS : 第 2 分冊, 153
ZBHPLX : 第 2 分冊, 160
ZBHPMS : 第 2 分冊, 155
ZBHPSL : 第 2 分冊, 145
ZBHPUC : 第 2 分冊, 151
ZBHPUD : 第 2 分冊, 149
ZBHRDI : 第 2 分冊, 175
ZBHRLS : 第 2 分冊, 170
ZBHRLX : 第 2 分冊, 177
ZBHRMS : 第 2 分冊, 172
ZBHRSL : 第 2 分冊, 162
ZBHRUC : 第 2 分冊, 168
ZBHRUD : 第 2 分冊, 166
ZCGEAA : 第 1 分冊, 155
ZCGEAN : 第 1 分冊, 158
ZCGHAA : 第 1 分冊, 306
ZCGHAN : 第 1 分冊, 310
ZCGJAA : 第 1 分冊, 312
ZCGJAN : 第 1 分冊, 316
ZCGKAA : 第 1 分冊, 318
ZCGKAN : 第 1 分冊, 322
ZCGNAA : 第 1 分冊, 160
ZCGNAN : 第 1 分冊, 163
ZCGRAA : 第 1 分冊, 300
ZCGRAN : 第 1 分冊, 304
ZCHEAA : 第 1 分冊, 197
ZCHEAN : 第 1 分冊, 200
ZCHEEE : 第 1 分冊, 208
ZCHEEN : 第 1 分冊, 212
ZCHESN : 第 1 分冊, 206
ZCHESS : 第 1 分冊, 202
ZCHJSS : 第 1 分冊, 258
ZCHRAA : 第 1 分冊, 179
ZCHRAN : 第 1 分冊, 182
ZCHREE : 第 1 分冊, 190
ZCHREN : 第 1 分冊, 195
ZCHRSN : 第 1 分冊, 188
ZCHRSS : 第 1 分冊, 184
ZFC1BF : 第 3 分冊, 53
ZFC1FB : 第 3 分冊, 50
ZFC2BF : 第 3 分冊, 103
ZFC2FB : 第 3 分冊, 100
ZFC3BF : 第 3 分冊, 128
ZFC3FB : 第 3 分冊, 125
ZFCMBF : 第 3 分冊, 79
ZFCMFB : 第 3 分冊, 76
ZIBH1N : 第 5 分冊, 131
ZIBH2N : 第 5 分冊, 133
ZIBINZ : 第 5 分冊, 118
ZIBJNZ : 第 5 分冊, 85
ZIBKNZ : 第 5 分冊, 120
ZIBYNZ : 第 5 分冊, 87
ZIGAMZ : 第 5 分冊, 168
ZIGLGZ : 第 5 分冊, 170
ZLACHA : 第 5 分冊, 327
ZLNCIS : 第 5 分冊, 342

アプリケーションシステム

**科学技術計算ライブラリ**

**ASL ユーザーズガイド**

〈基本機能編 第2分冊〉

2023年3月 ASL (1.1)

付属説明書 3.0.0-230301

**日本電気株式会社**