目 次

1 はじめに **1**

1.1 なぜ templates を使うのか ？ 2

1.2 どんな解法が含まれているか 3

2 反復法 **5**

2.1 解法の概要 5

2.2 定常的な反復法 8

2.2.1 Jacobi 法 8

2.2.2 ガウス–ザイデル法 10

2.2.3 逐次的過剰緩和法 11

2.2.4 対称逐次的過剰緩和法 13

2.2.5 注釈と文献 15

2.3 非定常的な反復法 15

2.3.1 共役勾配法 (CG 法) 15

2.3.2 最小残差法 (MINRES 法) と対称 LQ 法 (SYMMLQ 法) 19

2.3.3 正規方程式に対する CG 法，CGNE 法および CGNR 法 21

2.3.4 一般化最小残差法 (GMRES 法) 21

2.3.5 双共役勾配法 (BiCG 法) 24

2.3.6 擬似的最小残差法 (QMR 法) 27

2.3.7 ２乗共役勾配法 (CGS 法) 28

2.3.8 安定化双共役勾配法 (Bi-CGSTAB 法) 30

2.3.9 チェビシェフ反復法 33

2.4 反復法のまとめ 36

2.5 クリロフ法の簡単な歴史[1] 40

2.6 最近のクリロフ法の文献調査 42

3 前処理行列 **47**
3.1 なぜ，そしてどのように . . . 47
3.1.1 コストのトレードオフ . . . 47
3.1.2 前処理行列に対する理論的な必要条件 . . . 48
3.2 点 Jacobi 前処理 . . . 49
3.2.1 ブロック Jacobi 法 . . . 49
3.2.2 検討 . . . 50
3.3 SSOR 前処理 . . . 50
3.4 不完全分解前処理行列 . . . 51
3.4.1 不完全分解の生成 . . . 51
3.4.2 点不完全分解 . . . 52
3.4.3 ブロック分解法 . . . 55
3.4.4 不完全 LQ 分解 . . . 58
3.5 多項式前処理行列 . . . 58
3.6 微分方程式の性質に基づいた前処理行列 . . . 59
3.6.1 対称部分による前処理 . . . 59
3.6.2 高速解法の使用 . . . 60
3.6.3 ADI 法 . . . 60

4 関連項目 **63**
4.1 複素方程式 . . . 63
4.2 停止規準 . . . 63
4.2.1 停止規準に関する詳細 . . . 65
4.2.2 $r^{(i)}$ または $\|r^{(i)}\|$ が容易に使えないとき . . . 68
4.2.3 $\|A^{-1}\|$ の推定 . . . 69
4.2.4 もはや進展がないときの停止 . . . 70
4.2.5 浮動小数誤差についての説明 . . . 70
4.3 データ構造 . . . 71
4.3.1 疎行列格納形式の調査 . . . 71
4.3.2 行列–ベクトル積 . . . 77
4.3.3 疎行列の不完全分解 . . . 80
4.4 並列性 . . . 84
4.4.1 内積 . . . 84
4.4.2 ベクトルの更新 . . . 86
4.4.3 行列–ベクトル積 . . . 86

4.4.4 前処理 87
4.4.5 ガウス–ザイデル法や共役勾配法におけるウェーブフロント 88
4.4.6 GMRES 法におけるブロック演算 89

5 残された話題 **91**
5.1 ランチョス法との関連 91
5.2 ブロック反復法 92
5.3 前処理としての縮小された系 93
5.4 領域分割法 94
5.4.1 重なりのある部分領域法 95
5.4.2 重なりのない部分領域法 97
5.4.3 乗法的シュワルツ法 99
5.5 マルチグリッド法 101
5.6 行射影法 102

A ソフトウェアの入手方法 **103**

B BLAS 概説 **105**

C 用語集 **109**

D ディスクの内容とルーチン説明 **119**
D.1 フロッピーディスクの内容 119
D.2 Fortran 倍精度実数版 templates のルーチン説明 119

E プログラム例 **139**