おしらせ

プログラム・ライブラリィへの新規登録

当大型計算機センターの研究開発計画の一環として進められていましたプログラム・ライブラリィ開発の内，下記の一覧表の科学計算用サブプログラム・ライブラリィが完成致しました。これらプログラムは，昭和51年1月より向う一年間，試用期間として一般に公開されることになりました。以下，プログラム名の一覧及び使用法の説明を致します。

科学計算用ライブラリィ一覧表（共役勾配法）

SUBROUTINE 名		計算内容	作成者
単精度	倍精度		
SQACGS	SQACGD	連立一次方程式（正値対称正方行列）	阪大工学部　林　正
USQCGS	USQCGD	〃　（非対称正方行列）	〃
BANCGS	BANCGD	〃　（正値対称帯行列）	〃
UBNCGS	UBNCGD	〃　（非対称帯行列）	〃
CODCGS	CODCGD	〃　（正値対称行列，コードマッチング法）	〃
UCOCGS	UCOCGD	〃　（非対称行列，コードマッチングング法）	〃
BLOCGS	BLOCGD	〃　（正値対称行列，ブロックコードマッチング法）	〃
UBLCGS	UBLCGD	〃　（非対称行列，ブロックコードマッチング法）	〃

分類番号	連 立 一 次 方 程 式 (正値対称正方行列)
2 — 1	単精度　CALL　SQACGS(A, R, X, I, J, N, EPS, ISP, ITE, ILL) 倍精度　CALL　SQACGD(A, R, X, I, J, N, EPS, ISP, ITE, ILL)

1. 目　的

連立一次方程式を共役勾配法により解く。

$$\mathbf{Ax}=\mathbf{c}$$

ただし，係数行列 **A** は正定値対称でなければならない。

2. 入力データ

A……実数型2次元配列。A(I, J)

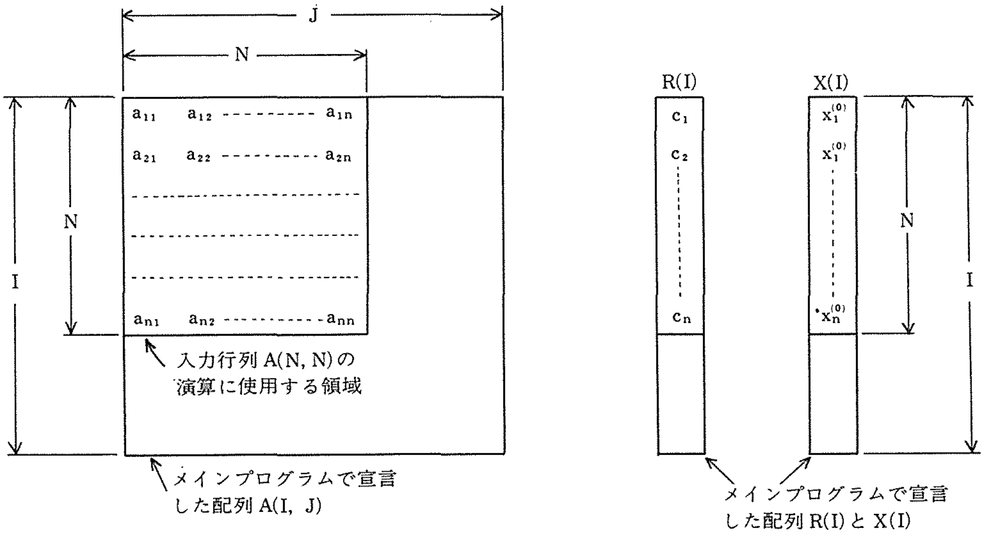
○係数行列 **A** を入れる。

R……実数型1次元配列。R(I)

○右辺の定数ベクトル **c** を入れる。

X……実数型1次元配列。X(I)

○連立方程式の解の初期値 $\mathbf{x}^{(0)}$（第0近似解）を入れる。



I……メインプログラムで宣言した配列Aの行数及び配列R, Xの次数。

J……メインプログラムで宣言した配列Aの列数。

N……連立一次方程式の次元数。

○上記，3つの入力パラメータは，いづれも整数型変数または整数型定数で，次の制約条件がある。

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

EPS……実数型変数または実数型定数。

○反復計算における収束精度を与える。

○残差ベクトルと解の近似ベクトルのノルムの比が，収束精度より小さな値になるまで反復計算を行なう。

すなわち，kを反復回数，r_iとx_iをそれぞれ残差ベクトルと解の近似ベクトルの各成分とすると，収束判定条件式は次のようになる。

$$\sqrt{\sum_{i=1}^{n}(r_i^{(k)})^2 \Big/ \sum_{i=1}^{n}(x_i^{(k)})^2} < \mathrm{EPS}$$

○EPSの値は所要精度により変えるべきであるが，通常の計算においては次の範囲内の値を用いればよい。

$$\mathrm{EPS}=\begin{cases}\text{単精度}\cdots\cdots 10^{-4}\sim 10^{-6}\\ \text{倍精度}\cdots\cdots 10^{-5}\sim 10^{-10}\end{cases}$$

ただし，0.0<EPS<1.0なること。

ISP……整数型変数または整数型定数。

○最大反復回数を与える。

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

○最大反復回数は，与える解の初期値$x^{(0)}$と行列Aの性質により一概にはいえないが，大体の値としては

ISP＝N～3N（ただし，ISP≧1なること）

ITE……整数型変数。

ITE＝0：一組の連立方程式を解くとき，または復数組の連立方程式を初めて解くとき。

ITE≠0：係数行列が同じで，定数ベクトルが異なる連立方程式を続けて解くとき。

○このときには，引数RとXの値を変えて，再びサブルーチンを呼ぶ必要がある。

○引数A, I, J, Nの値を変えてはいけない（注，配列Aを再定義した場合には，ITF＝0としなければならない)。

3．出力データ

R……残差ベクトル（$\bar{r}^{(k)}=\bar{c}-\bar{A}\bar{x}^{(k)}$）が入っている。ただし，$\bar{A}$, $\bar{c}$はスケーリングされている。

X……解$x^{(k)}$が与えられる。

ITE…計算終了時の反復回数が与えられる。

ILL…整数型変数。

○サブルーチン内での計算結果の状況が与えられる。

ILL＝0　　：計算が正常に行なわれたとき。

ILL…−90000：入力データに誤りがあったとき。

① 入力データI, J, N, ISP, EPSの値が制約条件に反したとき。

$N>I$, $N>J$, $N\leqq 1$, $N>200$, $ISP\leqq 0$, $EPS\leqq 0.0$

このとき，計算は全く行なわれず，すべての入力データはそのまま保存されている。

② 入力データAの主対角要素が正でないとき。

$A(I,I)\leqq 0.0 \quad (I=1, 2, \cdots\cdots, N)$

ILL＝ISP：制限回数以内に反復計算が収束しなかったとき。

4. エラーメッセージ

(1) 入力データに誤りがあったとき。

***** INPUT DATA ERROR *****

および，サブルーチン名とI, J, N, ISP, EPSの値をこの順序で印刷する。

(2) 行列Aが正定値でないとき。

入力データAの主対角要素が正でないとき，

***** DIAGONAL ELEMENT IS NOT POSITIVE *****

および，その要素の値と行（列）番号，A(I, I)を印刷する。

(3) 制限回数以内に反復計算が収束しなかったとき。

***** THE CALCULATION DOSE NOT CONVERGE *****

および，制限回数と反復回数を印刷する。このとき，配列RとXには最後の反復計算時の値が入っているので，残基ベクトルRの値が小さければ，近似解Xの値を用いることができる。

5. 使用上の注意事項

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

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

(3) サブルーチンから戻ったとき，ILL≧0のときにはAの内容は主対角要素が1になるようにスケーリングされている。ただし，主対角要素には，入力時の値の平方根の逆数が入っている。

$$\begin{cases} A(I,I)=1/\sqrt{a_{ii}} & (i=1, 2, \cdots, n) \\ A(I,J)=a_{ij}/\sqrt{a_{ii}\cdot a_{jj}} & (i, j=1, 2, \cdots, n;\ i\neq j) \end{cases}$$

(4) 本サブルーチンの制限次数は200元までである。

(5) 係数行列Aが正定値対称でない場合には使用できない（このときには，サブルーチン2－2を用いればよい)。

(6) 本サブルーチンでは次の作業領域を用いている。

$\left\{\begin{array}{l}\text{SQACGS……単精度実数型1次元配列：P (200), Q (200)}\\\text{SQACGD……倍精度実数型1次元配列：P (200), Q (200)}\end{array}\right.$

(7) 解の初期値がわからない場合には，右辺定数項の値を用いればよい。

(8) 共役勾配法では，係数行列Aが特異の場合でも，与えた初期値に対する特解が得られるので注意を要する。このときには，残差は小さくエラーメッセージは出ない。独立な2組の初期値を代入してみて，残差が小さく，かつ異った解が得られれば行列Aは特異である。

(9) 入力時，ITE≠0のときには，入力データのチェック及びスケーリングは行なわれない。

(10) 一般的に，サブルーチン1－1，1－2，1－3より計算時間は長くなる。

6．備　考

(1) 解　法

○正値対称行列に対する共役勾配法の公式を用いている。

○主対角要素でスケーリングを行っている。

(2) 使用組込み関数

$\left\{\begin{array}{l}\text{SQACGS……SQRT}\\\text{SQACGD……DSQRT}\end{array}\right.$

7．使用例（SQACGD）

○複数組の連立一次方程式を，定数ベクトルと初期値を変えて解く。このとき，方程式の組数をNOで与える。

```
      DOUBLE PRECISION A(100,120), R(100), X(100), EPS
      READ(5,10) N, NO, EPS
      READ(5,20) ((A(I,J), J=1,N), I=1,N)
      ITE=0
      DO 500 NCASE=1,NO
      READ(5,20) (R(I), I=1,N)
      READ(5,20) (X(I), I=1,N)
      CALL SQACGD(A, R, X, 100, 120, N, EPS, 2*N, ITE, ILL)
      IF(ILL) 100, 200, 100
  200 ....................
  500 CONTINUE
      .................
  100 .................
   10 FORMAT(.........)
   20 FORMAT(.........)
      ............
```

分類番号	連 立 一 次 方 程 式 （非対称正方行列）
2 — 2	単精度　CALL USQCGS(A, R, X, I, J, N, EPS, ISP, ITE, ILL) 倍精度　CALL USQCGD(A, R, X, I, J, N, EPS, ISP, ITE, ILL)

1．目　的

連立一次方程式を共役勾配法により解く。

$$\mathbf{A}\mathbf{x}=\mathbf{c}$$

係数行列 **A** は非対称または非正定値でもよい。

2．入力データ

サブルーチン2－1に同じ。ただし，ITEに値を与える必要はない。

3．出力データ

R……実数型1次元配列。R(I)

○残差ベクトル（$\bar{\mathbf{r}}^{(k)}=\bar{\mathbf{c}}-\bar{\mathbf{A}}\bar{\mathbf{x}}^{(k)}$）が入っている。ただし，$\bar{\mathbf{A}}$, $\bar{\mathbf{c}}$ はスケーリングされている。

X……実数型1次元配列。X(I)

○解 $\mathbf{x}^{(k)}$ が与えられる。

ITE…整数型変数。

○計算終了時の反復回数が与えられる。

ILL…整数型変数。

○サブルーチン内での計算結果の状況が与えられる。

ILL＝0　　　：計算が正常に行なわれたとき。

ILL＝－90000：入力データに誤りがあったとき。

① 入力データI, J, N, ISP, EPSの値が制約条件に反したとき。

$N>I$, $N>J$, $N\leqq 1$, $N>200$, $ISP\leqq 0$, $EPS\leqq 0.0$

このとき，計算は全く行なわれず，すべての入力データはそのまま保存されている。

② 入力データAの1行または1列のすべての要素が零のとき。

A(I, J)＝0.0（IまたはJ＝1, 2, …, N)

ILL＝ISP：制限回数以内に反復計算が収束しなかったとき。

4．エラーメッセージ

(1) 入力データに誤りがあったとき。

＊＊＊＊＊ INPUT DATA ERROR ＊＊＊＊＊

および，サブルーチン名とI, J, N, ISP, EPSの値をこの順序で印刷する。

(2) 行列Aが完全に特異なとき。

入力データAの1行または1列のすべての要素が零のとき，

***** MATRIX IS SINGULAR *****

および，その行または列番号を印刷する。

(3) 制限回数以内に反復計算が収束しなかったとき。

***** THE CALCULATION DOSE NOT CONVERGE *****

および，制限回数と反復回数を印刷する。このとき，配列RとXには最後の反復計算時の値が入っているので，残差ベクトルRの値が小さければ，近似解Xの値を用いることができる。

5．使用上の注意事項

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

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

(3) サブルーチンから戻ったとき，ILL≧0のときには，Aにはスケーリングされた値が入っている。

(4) 本サブルーチンの制限次数は200元までである。

(5) 本サブルーチンでは次の作業領域を用いている。

USQCGS……単精度実数型1次元配列：D(200)，P(200)，Q(200)
USQCGD……倍精度実数型1次元配列：D(200)，P(200)，Q(200)

(6) 解の初期値がわからない場合には，右辺定数項の値を用いればよい。

(7) 本サブルーチンでも，係数行列Aが特異な場合には，与えた初期値に対する特解が得られるので注意を要する。このときには残差は小さく，エラーメッセージは出ない（サブルーチン2－1の注意事項(8)を参照）。

(8) サブルーチン2－1より計算時間は長くなる。

6．備　考

(1) 解　法

○一般の行列に対する共役勾配法の公式を用いている。

○各行及び各列の最大要素でスケーリングを行っている。

(2) 使用組込み関数

USQCGS……ABS，SQRT
USQCGD……DABS，DSQRT

7．使用例（USQCGD）

DOUBLE PRECISION A(100, 150), R(100), X(100)

```
      READ(5, 10) N
      READ(5, 20) (R(I), I=1, N)
      READ(5, 20) (X(I), I=1, N)
      READ(5, 20) ((A(I, J), J=1, N), I=1, N)
      CALL USQCGD(A, R, X, 100, 150, N, 1. D-6, 2*N, ITE, ILL)
      IF(ILL. LT. 0) STOP
      ........................
   10 FORMAT(················)
   20 FORMAT(················)
      ........................
```

分類番号	連 立 一 次 方 程 式 （正値対称帯行列）
2 － 3	単精度　CALL BANCGS(A, R, X, P, Q, MJ, I, J, N, EPS, ISP, ITE, ILL) 倍精度　CALL BANCGD(A, R, X, P, Q, MJ, I, J, N, EPS, ISP, ITE, ILL)

1．目　的

連立一次方程式を共役勾配法により解く。ただし，係数行列Aは正定値対称でなければならない。

$$Ax = c$$

演算では，行列Aの右上半分の非零要素のみを帯行列の形で記憶する。

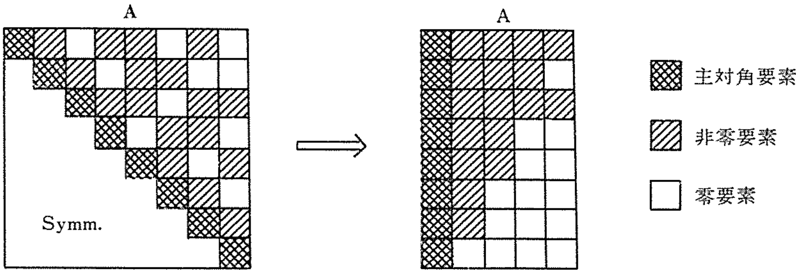
2．入力データ

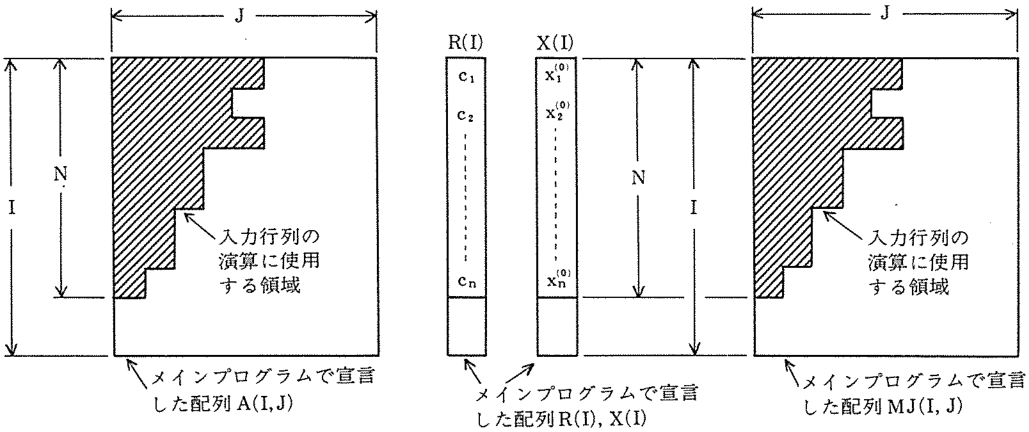
A……実数型2次元配列。A(I, J)

○零要素を除いて係数行列Aを各行において縮小し，Aの右上半分の非零要素のみを帯行列の形で記憶する。

○各行において，要素の列順序を変えてもよいが，もとの行列の主対角要素は縮小された帯行列の第1列目に入れなければならない。

○行の順序を変えてはいけない。





R……実数型１次元配列。R(I)

○右辺の定数ベクトル $\mathbf{c}$ を入れる。

X……実数型１次元配列。X(I)

○連立方程式の解の初期値 $\mathbf{x}^{(0)}$ （第０近似解）を入れる。

P, Q‥実数型１次元配列。P(I), Q(I)

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

MJ… 整数型２次元配列。MJ(I, J)

○もとの行列 $\mathbf{A}$ における配列 A(I, J) の要素の列番号を入れる。

○第１列目には，それぞれの行の非零要素の個数を入れる。

（入力例）

$$\mathbf{A}=\begin{pmatrix} 5 & 0 & -1 & 2 & 0 & 0 \\ & 6 & 2 & 0 & 3 & 1 \\ & & 3 & -1 & 0 & -2 \\ & & & 4 & 0 & -1 \\ & \text{Symm.} & & & 5 & 2 \\ & & & & & 3 \end{pmatrix},\quad \mathrm{A(I, J)}=\left(\begin{array}{c|ccc} 5 & 2 & -1 & \\ 6 & 2 & 1 & 3 \\ 3 & -1 & -2 & \\ 4 & -1 & & \\ 5 & 2 & & \\ 3 & & & \end{array}\right)$$

$$\mathrm{MJ(I, J)}=\left(\begin{array}{c|ccc} 3 & 4 & 3 & \\ 4 & 3 & 6 & 5 \\ 3 & 4 & 6 & \\ 2 & 6 & & \\ 2 & 6 & & \\ 1 & & & \end{array}\right)$$

I……メインプログラムで宣言した配列A, MJ の行数及び配列R, X, P, Qの次数。

J……メインプログラムで宣言した配列A, MJ の列数。

N……連立方程式の次元数。

○上記，３つの入力パラメータはいづれも整数型変数または整数型定数で，次の制約条件がある。

$$2 \leqq \mathrm{N} \leqq \mathrm{I},\quad \max_{1\leqq \mathrm{I} \leqq \mathrm{N}}[\mathrm{MJ(I, 1)}] \leqq \mathrm{J}$$

EPS…実数型変数または実数型定数。

○反復計算における収束精度を与える。

○残差ベクトルと解の近似ベクトルのノルムの比が，収束精度より小さな値になるまで反復計算を行なう。すなわち，k を反復回数とすると，

$$\sqrt{\sum_{i=1}^{n}(r_i^{(k)})^2 \Big/ \sum_{i=1}^{n}(x_i^{(k)})^2} < EPS$$

○EPSの値は所要精度により変えるべきであるが，通常の計算においては次の範囲内の値を用いればよい。

$$EPS=\begin{cases}\text{単精度}\cdots\cdots 10^{-4}\sim 10^{-6}\\ \text{倍精度}\cdots\cdots 10^{-5}\sim 10^{-10}\end{cases}$$

ただし，0.0<EPS<1.0 なること。

ISP…整数型変数または整数型定数。

○最大反復回数を与える。

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

○最大反復回数は，与える解の初期値 $\mathbf{x}^{(0)}$ と行列 $\mathbf{A}$ の性質により一概には言えないが，大体の値としては

ISP＝N～3N　（ただし，ISP≧1 なること)。

ITE…整数型変数。

ITE＝0：一組の連立方程式を解くとき，または複数組の連立方程式を初めて解くとき。

ITE≠0：係数行列が同じで，定数ベクトルが異なる連立方程式を続けて解くとき。

○このときには，引数RとXの値を変えて，再びサブルーチンを呼ぶ必要がある。

○引数A，MJ，I，J，Nの値を変えてはいけない（注．配列Aを再定義した場合には，ITE＝0 としなければならない)。

3．出力データ

R……残差ベクトル（$\bar{\mathbf{r}}^{(k)}=\bar{\mathbf{c}}-\bar{\mathbf{A}}\bar{\mathbf{x}}^{(k)}$）が入っている。ただし，$\bar{\mathbf{A}}, \bar{\mathbf{c}}$ はスケーリングされている。

X……解 $\mathbf{x}^{(k)}$ が与えられる。

ITE…計算終了時の反復回数が与えられる。

ILL…整数型変数。

○サブルーチン内での計算結果の状況が与えられる。

ILL＝0　　　：計算が正常に行なわれたとき。

ILL＝－90000：入力データに誤りがあったとき。

① 入力データI，N，ISP，EPSの値が制約条件に反したとき。

N>I，N≦1，ISP≦0，EPS≦0.0

② 入力データMJの値が正でないとき。

③ 入力データMJの第1列目の要素の最大値が制約条件に反したとき。

$$\max_{1\leq I\leq N}[MJ(I,1)] > J$$

④ 入力デ−−タAの第1列目の要素が正でないとき。

$$A(I,1) \leqq 0.0 \qquad (I=1,2,\cdots,N)$$

○上記，①,②,③の場合には計算は全く行なわれず，すべての入力はそのまま保存されている。

ILL＝ISP：制限回数以内に反復計算が収束しなかったとき。

4．エラーメッセージ

(1) 入力データに誤りがあったとき。

```
***** INPUT DATA ERROR *****
```

および，サブルーチン名と次のいづれかの値を印刷する。

① I, J, N, ISP, EPSの値をこの順序で印刷する。

② 正でないMJ の第1列目の値と添字の値MJ(I, 1)。

③ MJ の第1列目の値と添字の値MJ(I, 1)，および正でないMJの値と添字の値MJ(I, J)。

④ MJの第1列目の最大値max[MJ(I, 1)]と引数Jの値。

(2) 行列Aが正定値でないとき，

入力データAの第1列目の要素が正でないとき，

```
***** DIAGONAL ELEMENT IS NOT POSITIVE *****
```

および，その要素の値と行番号A(I, 1) を印刷する。

(3) 制限回数以内に反復計算が収束しなかったとき。

```
***** THE CALCULATION DOSE NOT CONVERGE *****
```

および，制限回数と反復回数を印刷する。このとき，配列RとXには最後の反復計算時の値が入っているので，残差ベクトルRの値が小さければ近似解Xの値を用いることができる。

5．使用上の注意事項

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

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

(3) サブルーチンから戻ったとき，ILL≧0のときにはAの内容は行列Aの主対角要素a_{ii}，すなわち配列Aの第1列目の要素が1になるようにスケーリングされている。ただし，Aの第1列目には入力時の値の平方根の逆数が入っている。

$$\begin{cases} A(I,1)=1/\sqrt{a_{ii}} & (i=1,2,\cdots,n) \\ A(I,J)=a_{ij}/\sqrt{a_{ii}\cdot a_{jj}} & (i,j=1,2,\cdots,n;\ i\neq j) \end{cases}$$

(4) 係数行列Aが正定値対称でない場合には使用できない（このときには，サブルーチン2−4を用いればよい)。

(5) 解の初期値がわからない場合には，右辺定数項の値を用いればよい。

(6) 本解法では，係数行列Aが特異の場合でも，与えた初期値に対する特解が得られるので注意を要する。このときには残差は小さく，エラーメッセージは出ない（サブルーチン2－1の注意事項(8)を参照)。

(7) 入力時，ITE≠0のときには，入力データのチェック及びスケーリングは行なわれない。

6．備　考

(1) 解　法

○正値対称行列に対する共役勾配法の公式を用いている。

○主対角要素でスケーリングを行っている。

(2) 使用組込み関数

$$\begin{cases} \text{BANCGS} \cdots\cdots \text{SQRT} \\ \text{BANCGD} \cdots\cdots \text{DSQRT} \end{cases}$$

7．使用例（BANCGS）

○複数組の連立一次方程式を，定数ベクトルと初期値を変えて続けて解く。このとき，方程式の組数をNOで与える。

```
      DIMENSION A(500, 30), R(500), X(500), P(500), Q(500), MJ(500, 30)
      READ(5, 10) N, M, ISP, NO
      READ(5, 10) ((MJ(I, J), J=1, M), I=1, N)
      READ(5, 20) ((A(I, J), J=1, M), I=1, N)
      ITE=0
      DO 500 NCASE=1, NO
      READ(5, 20) (R(I), I=1, N)
      READ(5, 20) (X(I), I=1, N)
      CALL BANCGS(A, R, X, P, Q, MJ, 500, 30, N, 1.E-5, ISP, ITE, ILL)
      IF(ILL) 100, 200, 100
  200 ...............
  500 CONTINUE
      ...............
  100 ...............
   10 FORMAT(.........)
   20 FORMAT(.........)
      ...............
```

分類番号	連立一次方程式（非対称帯行列）
2 — 4	単精度　CALL UBNCGS(A, R, X, P, Q, MI, MJ, I, J, N, EPS, ISP, ITE, ILL) 倍精度　CALL UBNCGD(A, R, X, P, Q, MI, MJ, I, J, N, EPS, ITE, ILL)

1. 目　的

連立一次方程式を共役勾配法により解く。係数行列 **A** は，非対称でも非正定値でもよい。

$$\mathbf{A}\mathbf{x}=\mathbf{c}$$

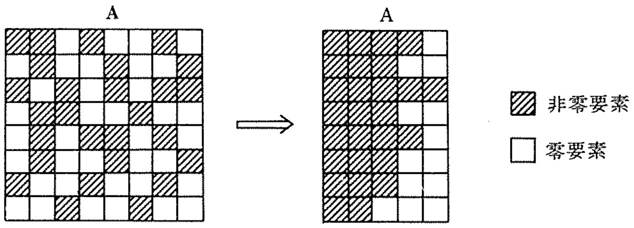
演算では，行列 **A** の非零要素のみを帯行列の形で記憶する。

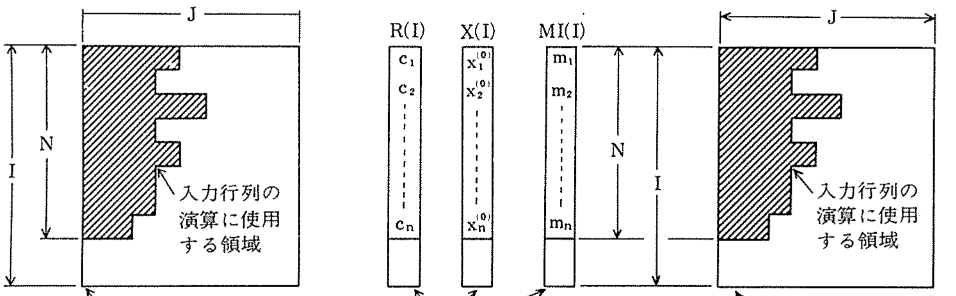
2. 入力データ

A……実数型2次元配列。A(I, J)

○零要素を除いて係数行列 **A** を各行において縮小し，非零要素のみを帯行列の形で記憶する。

○各行において，要素の列順序を変えてもよいが，行の順序を変えてはいけない。





R……実数型1次元配列。R(I)

○右辺の定数ベクトル **c** を入れる。

X……実数型1次元配列。X(I)

○連立方程式の解の初期値 $\mathbf{x}^{(0)}$（第0近似解）を入れる。

P, Q…実数型1次元配列。P(I), Q(I)

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

MI……整数型１次元配列。MI(I)

○それぞれの行の非零要素の個数を入れる。

MJ……整数型２次元配列。MJ(I, J)

○もとの行列A(I, J)の要素の列番号を入れる。

（入力例）

$$
A=\begin{bmatrix} 3 & 0 & 4 & 0 & -2 & 0 \\ 2 & 1 & 0 & 7 & 0 & 3 \\ 0 & -5 & 0 & 2 & 6 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 4 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & -2 & 0 & 1 & 4 \\ 0 & 0 & 0 & 5 & 0 & -3 \end{bmatrix},\quad
A(I, J)=\begin{bmatrix} -2 & 3 & 4 & \\ 1 & 2 & 7 & 3 \\ -5 & 2 & 6 & \\ 1 & 4 & & \\ 3 & -2 & 1 & 4 \\ 5 & -3 & & \end{bmatrix},\quad
MI(I)=\begin{bmatrix} 3 \\ 4 \\ 3 \\ 2 \\ 4 \\ 2 \end{bmatrix},
$$

$$
MJ(I, J)=\begin{bmatrix} 5 & 1 & 3 & \\ 2 & 1 & 4 & 6 \\ 2 & 4 & 5 & \\ 1 & 4 & & \\ 2 & 3 & 5 & 6 \\ 4 & 6 & & \end{bmatrix}
$$

I……メインプログラムで宣言した配列A, MJの行数及び配列R, X, P, Q, MI の次数。

J……メインプログラムで宣言した配列A, MJ の列数。

N……連立方程式の次元数。

○上記，３つの入力パラメータはいづれも整数型変数または整数型定数で，次の制約条件がある。

$$2 \leqq N \leqq I,\quad \max_{1 \leqq I \leqq N}[MI(I)] \leqq J$$

EPS…実数型変数または実数型定数。

○サブルーチン２－３に同じ。

ISP…整数型変数または整数型定数。

○サブルーチン２－３に同じ。

３．出力データ

R……残差ベクトル（$\bar{r}^{(k)}=\bar{c}-\bar{A}\bar{x}^{(k)}$）が入っている。ただし，$\bar{A}$, $\bar{c}$ はスケーリングされている。

X……解 $x^{(k)}$ が与えられる。

ITE…整数型変数。

○計算終了時の反復回数が与えられる。

ILL…整数型変数。

○サブルーチン内での計算結果の状況が与えられる。

ILL＝0　　　：計算が正常に行なわれたとき。

ILL＝−90000：入力データに誤りがあったとき。

① 入力データI, N, ISP, EPSの値が制約条件に反したとき。

$N>I,\ N\leqq 1,\ ISP\leqq 0,\ EPS\leqq 0.0$

② 入力データMIまたはMJの値が正でないとき。

③ 入力データMIの最大値が制約条件に反したとき。

$\max_{1\leqq I\leqq N}[MI(I)]>J$

④ 入力データAの1行のすべての要素が零のとき。

$A(I,J)=0.0 \qquad (J=1,2,\cdots, MI(I))$

○上記，①,②,③の場合には計算は全く行なわれず，すでの入力はそのまま保存されている。

ILL＝ISP：制限回数以内に反復計算が収束しなかったとき。

4．エラーメッセージ

(1) 入力データに誤りがあったとき。

***** INPUT DATA ERROR *****

および，サブルーチン名と次のいづれかの値を印刷する。

① I, J, N, ISP, EPSの値をこの順序で印刷する。

② 正でないMIの値を添字の値MI(I)。

③ MIの値と添字の値MI(I)，および正でないMJの値と添字の値MJ(I, J)。

④ MIの最大値max[MI(I)]と引数Jの値。

(2) 行列Aが完全に特異なとき。

入力データAの1行のすべての要素が零のとき，

***** MATRIX IS SINGULAR *****

および，その行番号を印刷する。

(3) 制限回数以内に反復計算が収束しなかったとき。

***** THE CALCULATION DOSE NOT CONVERGE *****

および，制限回数と反復回数を印刷する。このとき，配列RとXには最後の反復計算時の値が入っているので，残差ベクトルRの値が小さければ近似解Xの値を用いることができる。

5．使用上の注意事項

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

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

(3) サブルーチンから戻ったとき，ILL≧0のときにはAにはスケーリングされた値が入っている。

(4) 解の初期値がわからない場合には，右辺定数項の値を用いればよい。

(5) 本解法では，係数行列Aが特異の場合でも，与えた初期値に対する特解が得られるので注意を要する。このときには残差は小さく，エラーメッセージは出ない（サブルーチン2－1の注意事項(8)を参照)。

6. 備　考

(1) 解　法

○一般の行列に対する共役勾配法の公式を用いている。

○　各行の最大要素でスケーリングを行っている。

(2) 使用組込み関数

$\left\{\begin{array}{l}\text{UBNCGS}\cdots\cdots\text{ABS, SQRT}\\ \text{UBNCGD}\cdots\cdots\text{DABS, DSQRT}\end{array}\right.$

7. 使用例（UBNCGS）

```
      DIMENSION  A(500, 50), R(500), X(500), P(500), Q(500), MI(500), MJ(500, 50)
      ID=500
      JD=50
      READ(5, 10) N,M,ISP
      READ(5, 10) (MI(I), I=1, N)
      READ(5, 10) ((MJ(I, J), J=1, M), I=1, N)
      READ(5, 20) (R(I), I=1, N)
      READ(5, 20)  (X(I), I=1, N)
      READ(5, 20)  ((A(I, J), J=1, M), I=1, N)
      CALL  UBNCGS(A, R, X, P, Q, MI, MJ, ID, JD, N, 1.E-5, ISP, ITE, ILL)
      IF(ILL) 100, 200, 300
  100 ···············
  200 ···············
  300 ···············
   10 FORMAT(·········)
   20 FORMAT(·········)
      ···············
```

分類番号	連 立 一 次 方 程 式 (正値対称行列, コードマッチング法)
2 － 5	単精度 CALL CODCGS(D, U, R, X, P, Q, MI, I, L, N, M, EPS, ISP, ITE, ILL) 倍精度 CALL CODCGD(D, U, R, X, P, Q, MI, I, L, N, M, EPS, ISP, ITE, ILL)

1. 目 的

連立一次方程式を共役勾配法により解く。ただし，係数行列**A**は正定値対称でなければならない。

$$\mathbf{A}\mathbf{x}=\mathbf{c}$$

演算では，行列**A**の右上半分の非零要素のみをベクトルの形で記憶する。

2, 入力データ

D……実数型1次元配列。D(I)

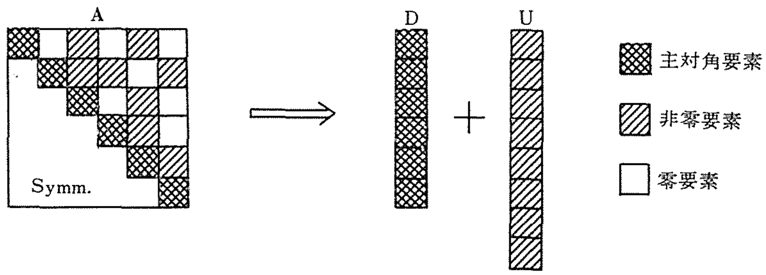
○係数行列**A**の主対角要素を入れる。

○行の順序を変えてはいけない。

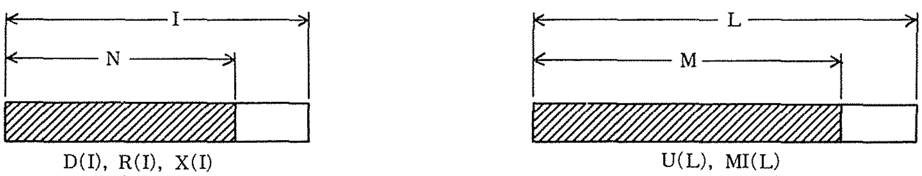
U……実数型1次元配列。U(L)

○係数行列**A**の右上半分の非零の非対角要素を入れる。

○行及び列の順序は任意でよい。



○下に示す図において，実線で囲まれた領域はメインプログラムにおいて宣言した配列の大きさであり，斜線の部分は演算に使用する領域を示す。



R……実数型1次元配列。R(I)

○右辺の定数ベクトル**c** を入れる。

X……実数型1次元配列。X(I)

○連立方程式の解の初期値$\mathbf{x}^{(0)}$（第0近似解）を入れる。

P, Q…実数型1次元配列。P(I), Q(I)

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

MI……整数型1次元配列。MI(L)

○もとの行列 **A** における配列Uの要素の行と列番号を入れる。

○1ワードの上4桁に行番号IMを，下4桁に列番号JMを入れる。

MI(L)=10000＊IM+JM　(1≦IM≦N, 1≦JM≦N)

I……メインプログラムで宣言した配列D, R, X, P, Qの次数。

L……メインプログラムで宣言した配列U, MI, の次数。

N……連立方程式の次元数。

M……行列 **A** の右上半分の非零の非対角要素の個数。

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

N≦I, 2≦N≦9999, 2≦M≦L

(入力例)

$$\mathbf{A}=\begin{bmatrix} 8 & 2 & 0 & -1 & 0 & -2 \\ & 7 & -3 & 0 & 1 & 0 \\ & & 4 & 0 & 0 & -1 \\ & & & 6 & 3 & 0 \\ & \text{Symm.} & & & 5 & 1 \\ & & & & & 6 \end{bmatrix}, \quad \begin{cases} N=6,\ M=8 \\ D(I)=[8\ \ 7\ \ 4\ \ 6\ \ 5\ \ 6] \\ U(L)=[2\ -3\ -1\ \ 1\ -1\ -2\ \ 3\ \ 1] \\ MI(L)=[10002\ \ 20003\ \ 10004\ \ 20005 \\ \qquad 30006\ \ 10006\ \ 40005\ \ 50006] \end{cases}$$

EPS…実数型変数または実数型定数。

○反復計算における収束精度を与える。

○残差ベクトルと解の近似ベクトルのノルムの比が，収束精度より小さな値になるまで反復計算を行なう。すなわち，kを反復回数とすると，

$$\sqrt{\sum_{i=1}^{n}(r_i^{(k)})^2 \Big/ \sum_{i=1}^{n}(x_i^{(k)})^2} < EPS$$

○EPSの値は所要精度により変えるべきであるが，通常の計算においては次の範囲の値を用いればよい。

$$EPS=\begin{cases} \text{単精度}\cdots\cdots 10^{-4}\sim 10^{-6} \\ \text{倍精度}\cdots\cdots 10^{-5}\sim 10^{-10} \end{cases}$$

ただし，0.0<EPS<1.0なること。

ISP…整数型変数または整数型定数。

○最大反復回数を与える。

○繰返し計算において，反復回数が最大反復回数を越えても収束しないときには演算

を打切る。

○最大反復回数は，与える解の初期値 $\mathbf{x}^{(0)}$ と行列 $\mathbf{A}$ の性質により一概にはいえないが，大体の値としては

ISP＝N～3N　（ただし，ISP≧1 なること）。

ITE…整数型変数。

ITE＝0：一組の連立方程式を解くとき，または複数組の連立方程式を初めて解くとき。

ITE≠0：係数行列が同じで，定数ベクトルが異なる連立方程式を続けて解くとき。

○このときには，引数RとXの値を変えて，再びサブルーチンを呼ぶ必要がある。

○引数D，U，MI，I，L，N，Mの値を変えてはいけない（注．配列D，Uを再定義した場合には，ITE＝0としなければならない）。

3．出力データ

R……残差ベクトル（$\bar{\mathbf{r}}^{(k)}=\bar{\mathbf{c}}-\bar{\mathbf{A}}\bar{\mathbf{x}}^{(k)}$）が入っている。ただし，$\bar{\mathbf{A}}$，$\bar{\mathbf{c}}$ はスケーリングされている。

X……解 $\mathbf{x}^{(k)}$ が与えられる。

ITE……計算終了時の反復回数が与えられる。

ILL…整数型変数。

○サブルーチン内での計算結果の状況が与えられる。

ILL＝0　　　：計算が正常に行なわれたとき。

ILL＝－90000：入力データに誤りがあったとき。

① 入力データI，L，N，M，ISP，EPSの値が制約条件に反したとき。

N＞I，M＞L，M≦1，N≦1，N≧10000，ISP≦0，EPS≦0.0

② 入力データMIの値が制約条件に反したとき。

③ 入力データDが正でないとき。

D(I)≦0.0　（I＝1，2，…，N）

○上記①，②の場合には，すべての入力はそのまま保存されている。

ILL＝ISP：制限回数以内に反復計算が収束しなかったとき。

4．エラーメッセージ

(1) 入力データに誤りがあったとき。

＊＊＊＊＊ INPUT DATA ERROR ＊＊＊＊＊

および，サブルーチン名と次のいずれかの値を印刷する。

① I，L，N，M，ISP，EPSの値をこの順序で印刷する。

② 配列MI(L)の添字LとMIの値及び引数Nの値を印刷する。

(2) 行列 $\mathbf{A}$ が正定値でないとき。

入力データDが正でないとき，

***** DIAGONAL ELEMENT IS NOT POSITIVE *****

および，その要素の値と行番号D(I)を印刷する。

(3) 制限回数以内に反復計算が収束しなかったとき。

***** THE CALCULATION DOSE NOT CONVERGE *****

および，制限回数と反復回数を印刷する。このとき，配列RとXには最後の反復計算時の値が入っているので，残差ベクトルRの値が小さければ近似解Xの値を用いることができる。

5．使用上の注意事項

(1) CODCGDを用いるときには，実引数D, U, R, X, P, Q, EPSは倍精度指定の宣言をする必要がある。

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

(3) サブルーチンから戻ったとき，ILL≧0のときにはUの内容は行列Aの主対角要素a_{ii}，すなわち配列Dの要素が1になるようにスケーリングされている。ただし，Dには入力時の値の平方根の逆数が入っている。

$$\begin{cases} D(I) = 1/\sqrt{a_{ii}} & (i=1,2,\cdots,n) \\ U(L) = a_{ij}/\sqrt{a_{ii}\cdot a_{jj}} & (i,j=1,2,\cdots,n;\ i\neq j,\ ) \end{cases}$$

(4) 係数行列が正定値対称でない場合には使用できない（このときには，サブルーチン2－6を用いればよい）。

(5) 解の初期値がわからない場合には，右辺定数項の値を用いればよい。

(6) 本解法では，係数行列Aが特異の場合でも，与えた初期値に対する特解が得られるので注意を要する。このときには残差は小さく，エラーメッセージは出ない。独立な2組の初期値を代入してみて，残差が小さく，かつ異った解が得られれば行列Aは特異である。

(7) 入力時，ITE≠0のときには，スケーリングは行なわれない。

6．備　考

(1) 解　法

○正値対称行列に対する共役勾配法の公式を用いている。

○主対角要素でスケーリングを行っている。

(2) 使用組込み関数

$$\begin{cases} \text{CODCGS}\cdots\cdots\text{SQRT} \\ \text{CODCGD}\cdots\cdots\text{DSQRT} \end{cases}$$

7．使用例（CODCGS）

○複数組の連立一次方程式を，定数ベクトルと初期値を変えて続けて解く。このとき，方程式の組数をNOで与える。

```
      DIMENSION D(100), R(100), X(100), P(100), Q(100), U(500), MI(500)
      DATA ID,LD, /100, 500 /
      READ(5, 10) N, M, ISP, NO
      READ(5, 20) (MI(L), L=1, M)
      READ(5, 30) (D(I), I=1, N)
      READ(5, 30) (U(L), L=1, M)
      ITE=0
      DO 500 NCASE=1, NO
      READ(5, 30) (R(I), I=1, N)
      READ(5, 30) (X(I), I=1, N)
      CALL CODCGS(D, U, R, X, P, Q, MI, ID, LD, N, M, 1. E-5, ISP, ITE, ILL)
      IF(ILL) 100, 200, 100
  200 ...............
  500 CONTINUE
      ...............
  100 ...............
   10 FORMAT(.........)
   20 FORMAT(.........)
   30 FORMAT(.........)
      ...............
```

分類番号	連　立　一　次　方　程　式　（非対称行列，コードマッチング法）
2 − 6	単精度　CALL UCOCGS(A, R, X, D, P, Q, MI, I, L, N, M, EPS, ISP, ITE, ILL) 倍精度　CALL UCOCGD(A, R, X, D, P, Q, MI, I, L, N, M, EPS, ISP, ITE, ILL)

1．目　的

連立一次方程式を共役勾配法により解く。係数行列**A**は，非対称でも非正定値でもよい。

$$\mathbf{A}\mathbf{x}=\mathbf{c}$$

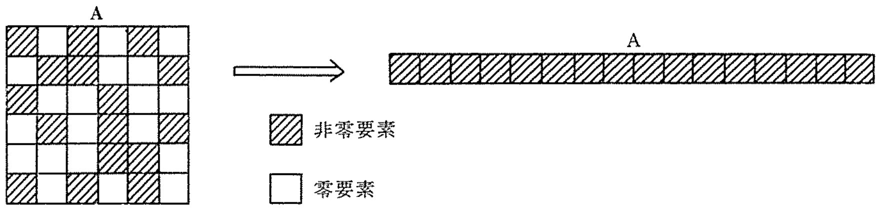
演算では，行列**A**の非零要素のみをベクトルの形で記憶する。

2．入力データ

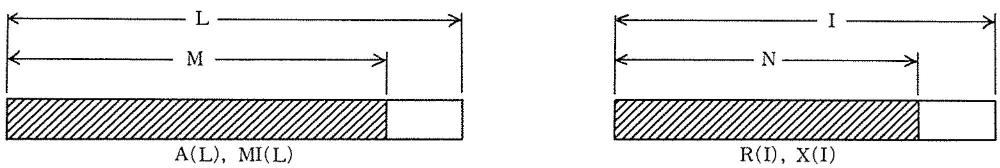
A……実数型1次元配列。A(L)

○係数行列**A**の非零要素のみを入れる。

○行及び列の順序は任意でよい。



○下に示す図において，実線で囲まれた領域はメインプログラムにおいて宣言した配列の大きさであり，斜線の部分は演算に使用する領域を示す。



R……実数型1次元配列。R(I)

○右辺の定数ベクトル$\mathbf{c}$を入れる。

X……実数型1次元配列。X(I)

○連立方程式の解の初期値$\mathbf{x}^{(0)}$（第0近似解）を入れる。

D, P, Q…実数型1次元配列。D(I)，P(I)，Q(I)

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

MI……整数型1次元配列。MI(L)

○もとの行列Aにおける配列Aの要素の行と列番号を入れる。

○1ワードの上4桁に行番号IMを，下4桁に列番号JMを入れる。

$$MI(L)=10000*IM+JM \quad (1\leq IM\leq N,\ 1\leq JM\leq N)$$

I……メインプログラムで宣言した配列R, X, D, P, Qの次数。

L……メインプログラムで宣言した配列A, MI の次数。

N……連立方程式の次元数。

M……行列Aの非零要素の個数。

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

$$N\leq I,\ 2\leq N\leq 9999,\ 2\leq M\leq L$$

（入力例）

$$A=\begin{pmatrix} 5 & 0 & 3 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & -3 & 2 & 0 & 0 & 1 \\ -6 & 0 & 0 & 4 & 0 & 0 \\ 0 & 5 & 0 & 1 & 0 & 3 \\ 0 & 0 & 0 & -2 & -5 & 0 \\ 3 & 0 & 7 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix},\quad \left\{\begin{array}{l} N=6,\ M=16 \\ A(L)=[5\ 3\ -3\ 2\ -6\ 4\ -1\ 1\ 5\ 1\ 3 \\ \qquad -2\ -5\ 3\ 7\ -1] \\ MI(L)=[10001\ \ 10003\ \ 20002\ \ 20003 \\ \qquad 30001\ \ 30004\ \ 10005\ \ 20006 \\ \qquad 40002\ \ 40004\ \ 40006\ \ 50004 \\ \qquad 50005\ \ 60001\ \ 60003\ \ 60005] \end{array}\right.$$

EPS…実数型変数または実数型定数。

○サブルーチン2－5に同じ。

ISP…整数型変数または整数型定数。

○サブルーチン2－5に同じ。

3. 出力データ

R……残差ベクトル（$\bar{r}^{(k)}=\bar{c}-\bar{A}\bar{x}^{(k)}$）が入っている。ただし，$\bar{A}$, $\bar{c}$ はスケーリングされている。

X……解 $x^{(k)}$ が与えられる。

ITE…整数型変数。

○計算終了時の反復回数が与えられる。

ILL…整数型変数。

○サブルーチン内での計算結果の状況が与えられる。

ILL＝0　　：計算が正常に行なわれたとき。

ILL＝－90000：入力データに誤りがあったとき。

① 入力データI, L, N, M, ISP, EPSの値が制約条件に反したとき。

$N>I,\ M>L,\ M\leq 1,\ N\leq 1,\ N\geq 10000,\ ISP\leq 0,\ EPS\leq 0.0$

② 入力データ MI の値が制約条件に反したとき。

③ 入力データAの値が，もとの行列Aにおいて，1行または1列のすべての要素が零のとき。

○上記①,②の場合には，すべての入力はそのまま保存されている。

ILL＝ISP：制限回数以内に反復計算が収束しなかったとき。

4．エラーメッセージ

(1) 入力データに誤りがあったとき。

***** INPUT DATA ERROR *****

および，サブルーチン名と次のいづれかの値を印刷する。

① I, L, N, M, ISP, EPSの値をこの順序で印刷する。

② 配列MI(L)の添字LとMIの値及び引数Nの値を印刷する。

(2) 行列Aが完全に特異なとき。

入力データAの値が，もとの行列Aにおいて，1行または1列のすべての要素が零のとき，

***** MATRIX IS SINGULAR *****

および，その行または列番号を印刷する。

(3) 制限回数以内に反復計算が収束しなかったとき。

***** THE CALCULATION DOSE NOT CONVERGE *****

および，制限回数と反復回数を印刷する。このとき，配列RとXには最後の反復計算時の値が入っているので，残差ベクトルRの値が小さければ近似解Xの値を用いることができる。

5．使用上の注意事項

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

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

(3) サブルーチンから戻ったとき，ILL≧0のときにはAにはスケーリングされた値が入っている。

(4) 解の初期値がわからない場合には，右辺定数項の値を用いればよい。

(5) 本解法では，係数行列Aが特異の場合でも，与えた初期値に対する特解が得られるので注意を要する。このときには残差は小さく，エラーメッセージは出ない（サブルーチン2－5の注意事項(6)を参照)。

6．備　考

(1) 解　法

○一般の行列に対する共役勾配法の公式を用いている。

○各行及び各列の最大要素でスケーリングを行っている。

(2) 使用組込み関数

$\begin{cases}\text{UCOCGS}\cdots\cdots\text{ABS, SQRT}\\ \text{UCOCGD}\cdots\cdots\text{DABS, DSQRT}\end{cases}$

7. 使用例（UCOCGD）

```
      DOUBLE PRECISION A(500), R(100), X(100), D(100), P(100), Q(100)
      DIMENSION MI(500)
      READ(5, 10) N, M
      READ(5, 20) (MI(L), L=1, M)
      READ(5, 30) (A(L), L=1, M)
      READ(5, 30) (R(I), I=1, N)
      READ(5, 30) (X(I), I=1, N)
      CALL UCOCGD(A, R, X, D, P, Q, MI, 100, 500, N, M, 1.D-6, 2*N, ITE, ILL)
      IF(ILL) 100, 200, 300
  100 ···············
  200 ···············
  300 ···············
   10 FORMAT(·········)
   20 FORMAT(·········)
   30 FORMAT(·········)
      ···············
```

分類番号	連 立 一 次 方 程 式 （正値対称行列，ブロックコードマッチング法）
2 − 7	単精度　CALL BLOCGS(D, U, R, X, P, Q, MI, I, J, L, KD, N, M, K, EPS, ISP, ITE, ILL) 倍精度　CALL BLOCGD(D, U, R, X, P, Q, MI, I, J, L, KD, N, M, K, EPS, ISP, ITE, ILL)

1．目　的

連立一次方程式を共役勾配法により解く。ただし，係数行列Aは正定値対称でなければならない。

$$\mathbf{Ax}=\mathbf{c}$$

演算では，行列Aを正方小行列に分割し，右上半分の非零要素を含む小行列のみを記憶する。

2．入力データ

D……実数型2次元配列。D(I, KD)

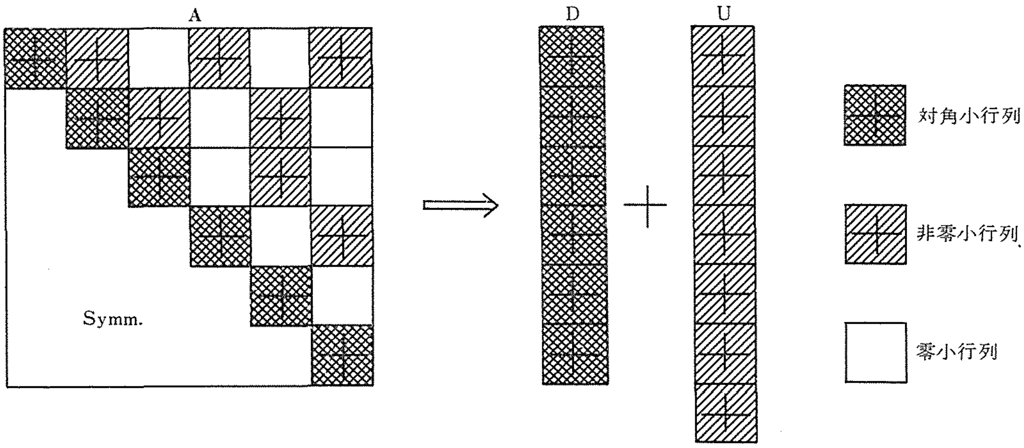
○係数行列Aの対角小行列を入れる。このとき，小行列の左下半分の要素にも値を入れること。

○小行列の順序および小行列内の要素の配列順序を変えてはいけない。

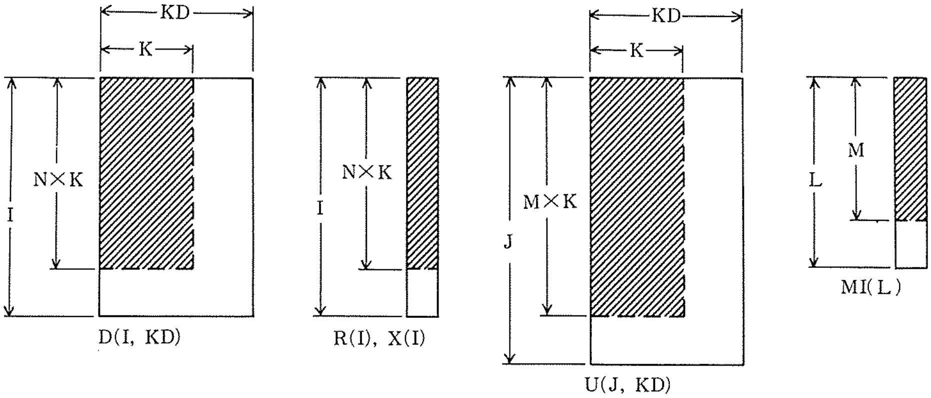
U……実数型2次元配列。U(J, KD)

○係数行列Aの右上半分において，非零要素を含む非対角小行列を入れる。

○小行列の順序は任意でよいが，小行列内の要素の配列順序を変えてはいけない。



○次に示す図において，実線で囲まれた領域はメインプログラムにおいて宣言した配列の大きさであり，斜線の部分は演算に使用する領域を示す。



R……実数型１次元配列。R(I)

○右辺の定数ベクトル**c** を入れる。

X……実数型１次元配列。X(I)

○連立方程式の解の初期値$\mathbf{x}^{(0)}$（第０近似解）を入れる。

P，Q…実数型１次元配列。P(I)，Q(I)

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

MI……整数型１次元配列。MI(L)

○もとの行列**A**における配列Uの小行列の行と列の番号を入れる（注．要素の番号ではない)。

○１ワードの上４桁に行番号IMを，下４桁に列番号JMを入れる。

MI(L)＝10000＊IM＋JM　（１≦IM≦N，１≦JM≦N)

I……メインプログラムで宣言した配列Dの行数及び配列R，X，P，Qの次数。

J……メインプログラムで宣言した配列Uの行数。

L……メインプログラムで宣言した配列MI の次数。

KD……メインプログラムで宣言した配列D，Uの列数。

N……対角小行列の個数。

M……行列**A**の右上半分の非零要素を含む非対角小行列の個数。

K……正方小行列の次元数。

○上記７つの入力パラメータは，いづれも整数型変数または整数型定数で，次の制約条件がある。

N×K ≦ I　M×K≦ J，２≦M≦L，１≦K≦KD，２≦N≦9999

(入力例)

$$
A=\left(\begin{array}{cc|cc|cc|cc}
8 & 2 & 1 & 3 & 0 & 0 & -1 & 0 \\
2 & 7 & 2 & -1 & 0 & 0 & 0 & -2 \\
\hline
 & & 4 & 0 & -2 & 1 & 0 & 1 \\
 & & 0 & 6 & -2 & 1 & 1 & 0 \\
\cline{3-8}
 & & & & 5 & -1 & 0 & 1 \\
 & & & & -1 & 6 & 3 & 2 \\
\cline{5-8}
 & \text{Symm.} & & & & & 7 & 1 \\
 & & & & & & 1 & 6
\end{array}\right),
$$

N＝4， M＝5， K＝2

$$
D(I,K)=\left(\begin{array}{cc}
8 & 2 \\
2 & 7 \\
\hline
4 & 0 \\
0 & 6 \\
\hline
5 & -1 \\
-1 & 6 \\
\hline
7 & 1 \\
1 & 6
\end{array}\right),\quad
U(J,K)=\left(\begin{array}{cc}
1 & 3 \\
2 & -1 \\
\hline
-2 & 1 \\
-2 & 1 \\
\hline
0 & 1 \\
3 & 2 \\
\hline
-1 & 0 \\
0 & -2 \\
\hline
0 & 1 \\
1 & 0
\end{array}\right),\quad
MI(L)=\left(\begin{array}{c}
10002 \\
20003 \\
30004 \\
10004 \\
20004
\end{array}\right)
$$

EPS…実数型変数または実数型定数。

○反復計算における収束精度を与える。

○残差ベクトルと解の近似ベクトルのノルムの比が，収束精度より小さな値になるまで反復計算を行なう。すなわち，kを反復回数とすると，

$$
\sqrt{\sum_{i=1}^{n}(r_i^{(k)})^2 \Big/ \sum_{i=1}^{n}(x_i^{(k)})^2} < EPS
$$

○EPSの値は所要精度により変えるべきであるが，通常の計算においては次の範囲内の値を用いればよい。

$$
EPS=\begin{cases} \text{単精度}\cdots\cdots 10^{-4}\sim 10^{-6} \\ \text{倍精度}\cdots\cdots 10^{-5}\sim 10^{-10} \end{cases}
$$

ただし，0.0＜EPS＜1.0　なること。

ISP…整数型変数または整数型定数。

○最大反復回数を与える。

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

○最大反復回数は，与える解の初期値 $x^{(0)}$ と行列Aの性質により一概にはいえないが，大体の値としては

ISP＝N×K～3N×K　（ただし，ISP≧1なること）。

ITE……整数型変数。

ITE＝0：一組の連立方程式を解くとき，または複数組の連立方程式を初めて解くとき。

ITE≠0：係数行列が同じで，定数ベクトルが異なる連立方程式を続けて解くとき。

○このときには，引数RとXの値を変えて，再びサブルーチンを呼ぶ必要がある。

○引数D, U, MI, I, J, L, KD, N, M, Kの値を変えてはいけない（注．配列D, Uを再定義した場合には，ITE＝0としなければならない）。

3．出力データ

R……残差ベクトル（$\bar{r}^{(k)}=\bar{c}-\bar{A}\bar{x}^{(k)}$）が入っている。ただし，$\bar{A}$, $\bar{c}$ はスケーリングされている。

X……解 $x^{(k)}$ が与えられる。

ITE…計算終了時の反復回数が与えられる。

ILL…整数型変数。

○サブルーチン内での計算結果の状況が与えられる。

ILL＝0　　：計算が正常に行なわれたとき。

ILL＝−90000：入力データに誤りがあったとき。

① 入力データI, J, L, KD, N, M, K, ISP, EPSの値が制約条件に反したとき。
N×K＞I, M×K＞J, M＞L, K＞KD, K≦0, M≦1, N≦1, N≧10000, ISP≦0, EPS≦0.0

② 入力データMIの値が制約条件に反したとき。

③ 入力データDに含まれるもとの行列Aの主対角要素が正でないとき。
D(I, L)≦0.0　(I＝J×K−K＋L; J＝1, 2, …, N; L＝1, 2, …, K)

○上記①, ②の場合には，すべての入力はそのまゝ保存されている。

ILL＝ISP：制限回数以内に反復計算が収束しなかったとき。

4．エラーメッセージ

(1) 入力データに誤りがあったとき。

***** INPUT DATA ERROR *****

および，サブルーチン名と次のいづれかの値を印刷する。

① I, J, L, KD, N, M, K, ISP, EPSの値をこの順序で印刷する。

② 配列MI(L)の添字LとMIの値及び引数Nの値を印刷する。

(2) 行列Aが正定値でないとき。

入力データDに含まれるもとの行列Aの主対角要素が正でないとき，

***** DIAGONAL ELEMENT IS NOT POSITIVE *****

および，その要素の値と行および列番号D(I, L)を印刷する。

(3) 制限回数以内に反復計算が収束しなかったとき。

***** THE CALCULATION DOSE NOT CONVERGE *****

および，制限回数と反復回数を印刷する。このとき，配列RとXには最後の反復計算時の値が入っているので，残差ベクトルRの値が小さければ近似解Xの値を用いることができる。

5．使用上の注意事項

(1) $\mathrm{BL\bar{O}CGD}$を用いるときには，実引数D，U，R，X，P，Q，EPSは倍精度指定の宣言をする必要がある。

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

(3) サブルーチンから戻ったとき，ILL≧0のときにはDおよびUの内容は行列Aの主対角要素a_{ii}が1になるようにスケーリングされている。ただし，主対角要素が入っているDの場所には，入力時の値の平方根の逆数が入っている。

$$\begin{cases} D(I,L)=1/\sqrt{a_{ii}} & (I=J\times K-K+L;\ J=1,2,\cdots,N;\ L=1,2,\cdots,K) \\ D(I,L)=a_{ij}/\sqrt{a_{ii}\cdot a_{jj}} & (I,L;\ \text{上記以外の領域}) \end{cases}$$

$$U(J,L)=a_{ij}/\sqrt{a_{ii}\cdot a_{jj}} \quad (J=1,2,\cdots,M\times K;\ L=1,2,\cdots,K)$$

(4) 係数行列が正定値対称でない場合には使用できない（このときには，サブルーチン2－8を用いればよい)。

(5) 解の初期値がわからない場合には，右辺定数項の値を用いればよい。

(6) 本解法では，係数行列Aが特異の場合でも，与えた初期値に対する特解が得られるので注意を要する。このときには残差は小さく，エラーメッセージは出ない（サブルーチン2－5の注意事項(6)を参照)。

(7) 入力時，ITE≠0のときには，スケーリングは行なわれない。

6．備　考

(1) 解　法

○正値対称行列に対する共役勾配法の公式を用いている。

○主対角要素でスケーリングを行っている。

(2) 使用組込み関数

$$\begin{cases} \mathrm{BL\bar{O}CGS\cdots\cdots SQRT} \\ \mathrm{BL\bar{O}CGD\cdots\cdots DSQRT} \end{cases}$$

(3) 使用組込みサブルーチン

○ブロック行列とベクトルの積の演算を行なうため，次のサブルーチンを使用している。

$$\begin{cases} \mathrm{BL\bar{O}CGS\cdots\cdots SUBR\bar{O}UTINE\ BL\bar{O}PRS} \\ \mathrm{BL\bar{O}CGD\cdots\cdots SUBR\bar{O}UTINE\ BL\bar{O}PRD} \end{cases}$$

7. 使用例 (BLOCGS)

○複数組の連立一次方程式を，定数ベクトルと初期値を変えて続けて解く。このとき、方程式の組数をNOで与える。

```
      DIMENSION D(1000,5),U(2000,5),R(1000),X(1000),P(1000),Q(1000),
     1 MI(400)
      DATA ID,JD,LD,KD/1000,2000,400,5/
      READ(5,10) N,M,K,ISP,NO,EPS
      READ(5,20) (MI(L),L=1,M)
      READ(5,30) ((D(I,J),J=1,K),I=1,N*K)
      READ(5,30) ((U(I,J),J=1,K),I=1,M*K)
      ITE=0
      DO 500 NCASE=1,NO
      READ(5,30) (R(I),I=1,N*K)
      READ(5,30) (X(I),I=1,N*K)
      CALL BLOCGS(D,U,R,X,P,Q,MI,ID,JD,LD,KD,N,M,K,EPS,ISP,
     1 ITE,ILL)
      IF(ILL) 100,200,100
  200 ...............
  500 CONTINUE
      ...............
  100 ...............
   10 FORMAT(.........)
   20 FORMAT(.........)
   30 FORMAT(.........)
      ...............
```

分類番号	連 立 一 次 方 程 式 （非対称行列，ブロックコードマッチング法）
2 — 8	単精度　CALL UBLCGS(A, R, X, D, P, Q, MI, I, J, L, KD, N, M, K, EPS, ISP, ITE, ILL) 倍精度　CALL UBLCGD(A, R, X, D, P, Q, MI, I, J, L, KD, N, M, K, EPS, ISP, ITE, ILL)

1. 目　的

連立一次方程式を共役勾配法により解く。係数行列**A**は，非対称でも非正定値でもよい。

$$\mathbf{Ax}=\mathbf{c}$$

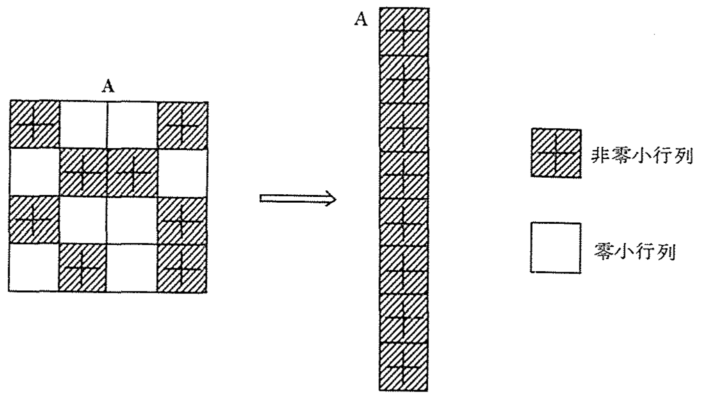
演算では，行列**A**を正方小行列に分割し，非零要素を含む小行列のみを記憶する。

2. 入力データ

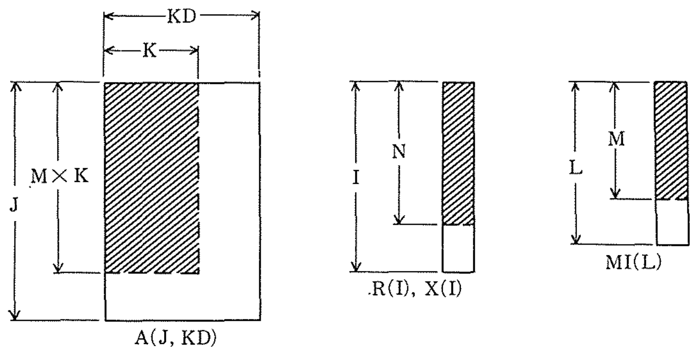
A……実数型2次元配列。A(J, KD)

○正方小行列に分割された行列**A**の非零要素を含む小行列のみを入れる。

○小行列の順序は任意でよいが，小行列内の要素の配列順序を変えてはいけない。



○下に示す図において，実線で囲まれた領域はメインプログラムにおいて宣言した配列の大きさであり，斜線の部分は演算に使用する領域を示す。



R……実数型1次元配列。R(I)

○右辺の定数ベクトル$\mathbf{c}$を入れる。

X……実数型1次元配列。X(I)

○連立方程式の解の初期値$\mathbf{x}^{(0)}$（第0近似解）を入れる。

D, P, Q…実数型1次元配列。D(I), P(I), Q(I)

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

MI……整数型1次元配列。MI(L)

○もとの行列**A**における配列Aの小行列の行と列の番号を入れる（注. 要素の番号ではない）。

○1ワードの上4桁に行番号IMを，下4桁に列番号JMを入れる。

MI(L)=10000*IM+JM　(1≦IM≦N/K, 1≦JM≦N/K)

I……メインプログラムで宣言した配列R, X, D, P, Qの次数。

J……メインプログラムで宣言した配列Aの行数。

L……メインプログラムで宣言した配列MIの次数。

KD…メインプログラムで宣言した配列Aの列数。

N……連立方程式の次元数。

M……非零小行列の個数。

K……正方小行列の次元数。

○上記，7つの入力パラメータはいづれも整数型変数または整数型定数で，次の制約条件がある。

N≦I, M×K≦J, 2≦M≦L, 1≦K≦KD, 2≦N≦9999

（入力例）　N=6, M=5, K=2

$$A=\left(\begin{array}{rr|rr|rr} -5 & -2 & 3 & 2 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 2 & 4 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 0 & -3 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -2 \\ \hline 0 & 2 & 0 & 0 & -3 & 4 \\ 2 & 0 & 0 & 0 & -1 & 2 \end{array}\right),\quad A(I,J)=\left(\begin{array}{rr} -5 & -2 \\ 1 & 0 \\ \hline 3 & 2 \\ 2 & 4 \\ \hline -3 & 1 \\ 1 & -2 \\ \hline 0 & 2 \\ 2 & 0 \\ \hline -3 & 4 \\ -1 & 2 \end{array}\right),\quad MI(L)=\left(\begin{array}{c} 10001 \\ 10002 \\ 20003 \\ 30001 \\ 30003 \end{array}\right)$$

EPS…実数型変数または実数型定数。

○サブルーチン2－7に同じ。

ISP…整数型変数または整数型定数。

○サブルーチン２－７に同じ。ただし，ISPの大体の値としては

$$ISP=N\sim 3N \quad (\text{ただし，}ISP\geqq 1\text{なること})。$$

3．出力データ

R……残差ベクトル（$\bar{r}^{(k)}=\bar{c}-\bar{A}\bar{x}^{(k)}$）が入っている。ただし，$\bar{A}$, $\bar{c}$ はスケーリングされている。

X……解 $x^{(k)}$ が与えられる。

ITE…整数型変数。

○計算終了時の反復回数が与えられる。

ILL…整数型変数。

○サブルーチン内での計算結果の状況が与えられる。

ILL＝0　　　：計算が正常に行なわれたとき。

ILL＝－90000：入力データに誤りがあったとき。

① 入力データI, J, L, KD, N, M, K, ISP, EPSの値が制約条件に反したとき。
$N>I$, $M\times K>J$, $M>L$, $K>KD$, $K\leqq 0$, $M\leqq 1$, $N\leqq 1$, $N\geqq 10000$, $ISP\leqq 0$, $EPS\leqq 0.0$

② 入力データMIの値が制約条件に反したとき。

③ 入力データAの値が，もとの行列Aにおいて，１行または１列のすべての要素が零のとき。

○上記，①,②の場合には，すべての入力はそのまま保存されている。

ILL＝ISP：制限回数以内に反復計算が収束しなかったとき。

4．エラーメッセージ

(1) 入力データに誤りがあったとき。

***** INPUT DATA ERROR *****

および，サブルーチン名と次のいづれかの値を印刷する。

① I, J, L, KD, N, M, K, ISP, EPSの値をこの順序で印刷する。

② 配列MI(L)の添字LとMIの値及び引数NとKの値を印刷する。

(2) 行列Aが完全に特異なとき。

入力データAの値が，もとの行列Aにおいて，１行または１列のすべての要素が零のとき，

***** MATRIX IS SINGULAR *****

および，その行または列番号を印刷する。

(3) 制限回数以内に反復計算が収束しなかったとき。

***** THE CALCULATION DOSE NOT CONVERGE *****

および，制限回数と反復回数を印刷する。このとき，配列RとXには最後の反復計算時の

値が入っているので，残差ベクトルRの値が小さければ近似解Xの値を用いることができる。

5．使用上の注意事項

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

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

(3) サブルーチンから戻ったとき，ILL≧0のときにはAにはスケーリングされた値が入っている。

(4) 解の初期値がわからない場合には，右辺定数項の値を用いればよい。

(5) 本解法では，係数行列Aが特異の場合でも，与えた初期値に対するする特解が得られるので注意を要する。このときには残差は小さく，エラーメッセージは出ない（サブルーチン２－５の注意事項(6)を参照)。

6．備　考

(1) 解　法

○一般の行列に対する共役勾配法の公式を用いている。

○各行および各列の最大要素でスケーリングを行っている。

(2) 使用組込み関数

UBLCGS……ABS, SQRT
UBLCGD……DABS, DSQRT

(3) 使用組込みサブルーチン

○ブロック行列とベクトルの積の演算を行なうため，次のサブルーチンを使用している。

UBLCGS……SUBROUTINE UBLPRS
UBLCGD……SUBROUTINE UBLPRD

7．使用例（UBLCGD)

```
      DOUBLE PRECISION A(2000,5), R(500), X(500), D(500), P(500), Q(500),
     1 EPS
      DIMENSION MI(400)
      READ(5,10) N,M,K,EPS
      READ(5,20) (MI(L), L=1,M)
      MK=M*K
      READ(5,30) ((A(I,J),J=1,K),I=1,MK)
      READ(5,30) (R(I),I=1,N)
      READ(5,30) (X(I),I=1,N)
      CALL UBLCGD(A,R,X,D,P,Q,MI,500,2000,400,5,N,M,K,EPS,2*N,
```

```
  1 ITE, ILL)
    IF(ILL) 100, 200, 300
100 ···············
200 ···············
300 ···············
 10 FORMAT(·········)
 20 FORMAT(·········)
 30 FORMAT(·········)
    ···············
```