

まえがき

数値計算法は計算科学を支える重要な基盤技術の一つである。流体計算や電子状態計算のような大規模シミュレーションはもちろんのこと、データの統計的解析や最適化、可視化においても数値計算が活躍する。近年では、様々な種類の数値計算についてライブラリが用意され、大規模な計算を高速・高精度に行える環境が整いつつある。しかし、多種多様なライブラリの中から自分の解きたい問題に合った解法を選ぶには、各解法の特徴について概観的な知識を持っておく必要がある。また、もし解法がうまく働かない場合、その原因を究明し、問題を解決するには、解法の動作原理と適用範囲を十分理解しておくことが不可欠である。

本書では、計算科学で使われる代表的な数値計算アルゴリズムについて、その原理と特徴を解説する。具体的には、数値表現と誤差、線形方程式、行列の固有値問題、線形最小二乗問題、非線形方程式、関数近似、数値微分、数値積分、常微分方程式、偏微分方程式の10の分野について、広く使われている数値計算アルゴリズムを取り上げ、それらを数学的原理に基づき導出するとともに、収束性、安定性、数値誤差などについても議論する。

本書の特徴を挙げると、以下のようになる。

- 計算科学の各分野で使われているアルゴリズムを、幅広く取り上げるようにした。たとえば偏微分方程式の解法としては、差分法、有限要素法、境界要素法に加えて、流体計算で広く使われるスペクトル法も紹介している。また、分子動力学などで重要な常微分方程式の解法については、線形多段法とルンゲ・クッタ法の両方を詳しく解説した。
- これまでの数値解析の入門書ではあまり取り上げられなかったアルゴリ

ズムでも、実用性の高い優れた解法については積極的に取り上げた。固有値計算のための分割統治法、代数方程式のための平野法、高速自動微分法などはその例である。

- 各アルゴリズムのアイデアの説明と解法の導出を、なるべくわかりやすく初等的に行うように心がけた。最良近似多項式に関するルメの第2算法の導出や、行列表現を用いたガウス型積分公式の導出は、特に工夫した点である。
- 各アルゴリズムの収束性、安定性、数値誤差などの理論的側面についても、できるだけ紹介するようにした。特に、代表的な固有値計算法であるQR法（対称行列向け）の収束解析では、反復過程における各変数の値を初期値を用いた明示的な式で表し、その結果を用いて収束定理を導出した。この解析法は、QR法の収束過程に関して豊富な情報が得られるという長所を持ち、類書に見られない本書の一つの特徴となっている。
- 第2巻「20世紀のトップテンアルゴリズム」との重複を避け、内容が相補的になるように心がけた。たとえば、線形方程式の解法のうち、本書では直接法と定常反復法を扱い、第2巻ではもう一つの重要なクラスであるクリロフ部分空間法を扱っている。固有値計算のためのQR法については、本書では対称行列向け解法を扱い、第2巻では別の（より標準的な）解析法により、非対称行列向け解法を扱っている。また、一般的に、本書ではアルゴリズムの原理と理論的解析を重視し、第2巻では各アルゴリズムの歴史的経緯や最近の発展を重視した記述になっている。

本書は、大学初年級程度の線形代数学と解析学の予備知識があれば、十分読み進められるものと考えている。また、第1章は数値計算全般に関わる基礎知識であるが、その後の章は比較的独立に読めるようになっている。前の章の知識が必要な部分については、明示的に参照するようにした。

計算科学を志す大学院生、研究者にとって本書が数値計算アルゴリズムの学習と利用に役立つならば、著者らにとって大きな喜びである。

最後に、本書の原稿に対して多くの貴重なコメントを下された久保田光一、谷口隆晴、中務佑治、宮武勇登の各先生に感謝したい。監修者の金田行雄先生と笹井理生先生、および三浦拓馬氏と石井徹也氏をはじめとする共立出版編集部の方々には、本書の完成を忍耐強く待っていただくとともに、多くのご支援を頂いた。ここに謝意を表したい。

2019年4月

編著者一同