解決法, 参考情報

### [問題 1 に対する解決策, 参考情報]

CG 法や Bi-CGSTAB 法などの Krylov 部分空間法の収束性は, 基本的には（前処理を作用させた後の）係数行列の固有値分布に依存します. 固有値が密集しているほど収束が良く, 逆に固有値が分散していると収束性が悪くなります. (ただし, 非対称行列の場合は必ずしもそうとは言えません.)

このため, CG 法が解けなくなる問題では, 固有値分布が分散していることが考えられます. 具体的には, 最大固有値と最小固有値の比が大きくなっていることが予想されます. 問題サイズを変更することで, 最大固有値が非常に大きくなっていないか, または最小固有値が非常に 0 に近くなっていないかをチェックしてみるとよいかと思います. 正定値対称行列の最大固有値と最小固有値はランチョス法である程度近似計算ができるかと思います.

また, 別の可能性としては, 丸め誤差が原因となる場合もあります. 大規模計算では難しいかもしれませんが, 多倍長計算した結果と比較するという方法で確認できるかと思います.

### [問題 2 に対する解決策, 参考情報]

現状では Bi-CGSTAB 法の前処理として対角要素の逆数をかける前処理を用いているとのことですが, 他の前処理を用いることで, 収束性を改善できる可能性があるかと思います.

例えば, 前処理に Jacobi 法や減速 Jacobi 法のような反復法を用いるという方法があります. この方法では不完全 LU 分解のような事前計算が不要で, また前処理行列を生成しませんので, 非常に大規模な問題に対しても適用できるかと思います.

また, 複素対称線形方程式 (1) を解くための解法 (COCG 法) や, 複素対称線形方程式 (1) を複数の $\omega$ に対して同時に解くための解法 (Shifted COCG 法) もあります. これらの解法は, 式 (2) に対する Bi-CGSTAB 法や式 (3) に対する CG 法に比べ有効となる場合もありますので, 併せて試してみると良いかと思います.

線形方程式に対する各種解法や, 前処理法に関しては, [1, 2, 3, 4] などに詳しく記されています.

## 参考文献

[1] Richard Barrett, Michael W. Berry, Tony F. Chan, James Demmel, June Donato, Jack Dongarra, Victor Eijkhout, Roldan Pozo, Charles Romine and Henk A. van der Vorst, Templates for the Solution of Linear Systems: Building Blocks for Iterative Methods, SIAM, Philadelphia, PA, 1993.

[2] 藤野清次, 張紹良, 反復法の数理, 朝倉書店, 東京, 1996.

[3] Yousef Saad, Iterative methods for sparse linear systems. 2nd edition, SIAM, Philadelphia, PA,

2003.
[4] 杉原正顯, 室田一雄, 線形計算の数理, 岩波書店, 東京, 2009.