問題の詳細

H を $N \times N$ 実対称行列, $|x\rangle, |b\rangle$ を N 次元ベクトル, E_g, ω をスカラーとした線形方程式

$$(H - E_g - \omega + \boldsymbol{i}\gamma)|x\rangle = |b\rangle \tag{1}$$

を複数の ω に対して解くことを考えている.

ここで, $\widetilde{H} := H - E_g - \omega$ とすると, 方程式 (1) は $|x\rangle = |x_1\rangle + \boldsymbol{i}\,|x_2\rangle$ を用い,

$$\begin{bmatrix} \widetilde{H} & -\gamma \\ \gamma & \widetilde{H} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} |x_1\rangle \\ |x_2\rangle \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} |b\rangle \\ 0 \end{bmatrix} \tag{2}$$

のように書き換えられる. また, 方程式 (2) は $|x_1\rangle = -(1/\gamma)\widetilde{H}\,|x_2\rangle$ の関係を用い,

$$(\widetilde{H}^2 + \gamma^2)\,|x_2\rangle = -\gamma\,|b\rangle \tag{3}$$

のように書き換えられる.

現在, 実非対称線形方程式 (2) に対して Bi-CGSTAB 法を適用する方法と, 実正定値対称線形方程式 (3) に対して CG 法を適用する方法を用いている. また, どちらの方法に対しても対角スケーリング前処理 (係数行列の対角要素の逆数をかける前処理) を用いている. この時, 問題サイズ (格子サイズ) を変えると解法が収束しなくなった.

問題 1. 似たような問題で急に収束が悪くなるのが何故なのか原因を特定するために, どういうことを調べていけばよいか, 助言を頂きたい.

問題 2. もしより良いアルゴリズムがありそうなら, 紹介して頂けると有難い.