解決法, 参考情報

現在使用されている Multimass shift BICGStab 法は, 通常の線形方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ に対する Bi-CGSTAB 法をシフト線形方程式

$$\begin{gathered}(A+\sigma_i)\boldsymbol{x}_i = \boldsymbol{b}, \quad i = 1, 2, \ldots, \\ A \in \mathbb{C}^{n\times n}, \quad \boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{b} \in \mathbb{C}^n, \quad \sigma_i \in \mathbb{R}\end{gathered} \tag{1}$$

に対して適用したアルゴリズムです. シフト線形方程式 (1) に対する他の有力なアルゴリズムとしては, Shifted BiCGStab(l) 法 [1] が知られています. Shifted Bi-CGStab(l) 法は, Bi-CGSTAB 法の拡張法である Bi-CGSTAB(l) 法をシフト線形方程式に対して適用したアルゴリズムで, 整数パラメータ l（通常 1〜8 程度）を適切に設定することで, 優れた収束性が期待されます.

反復法の有効性は問題の性質に強く依存しますので, 今回対象としている低次元の超対称ゲージ理論の問題に対して, 現在使われているアルゴリズムより必ずしも高速であるかは分かりませんが, 優れたアルゴリズムとして知られていますので, 一度お試し頂ければと思います. また, シフト線形方程式 (1) に対する各種アルゴリズムの概略については解説記事 [4] に詳しく書かれていますので, 参考にして頂ければと思います.

Shifted BiCGStab(l) 法の擬似コードは原著論文 [1] に記載してありますが, 複雑なためコーディングには手間がかかると思います. このため, 必ずしも有効とは言えない Shifted BiCGStab(l) 法をいきなり実装するよりは, 先に代表的な σ_i に対する 1 本の線形方程式に対して有効なアルゴリズム（Bi-CGSTAB 法や BiCGStab(l) 法などのクリロフ部分空間法）を調査し, そのアルゴリズムのシフト版を実装するという流れで開発を勧められるとよいかと思います. (基本的には, ほとんどのクリロフ部分空間法に対して, シフト版のアルゴリズムが提案されている, もしくは導出可能であり, また, その収束性は 1 本ずつ解いた場合と大きく変わりません.)

Bi-CGSTAB(l) 法などの通常の線形方程式 $A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ に対するクリロフ部分空間法は MATLAB[3] にも実装されています. また, 多くのクリロフ部分空間法に対応したライブラリとしては, Lis[2] などがあります.

参考文献

[1] Andreas Frommer, BiCGSTAB(l) for families of shifted linear systems, Computing, Vol.70, No.2, 2003, pp.87–109.

[2] Lis (a Library of Iterative Solvers for linear systems), http://www.ssisc.org/lis/index.ja.html.

[3] MATLAB, http://www.mathworks.co.jp/.

[4] 曽我部知広, 張紹良, 大規模シフト線形方程式の数値解法ークリロフ部分空間の性質に着目してー, 応用数理, Vol.19, No.3, 2009, pp.27-42.