行列計算における反復解法のデモンストレーション

科学技術分野における数値解析においては、計算精度と計算資源との間に厳しいトレードオフ関係が存在する。特に、場の理論（連続体力学）の基礎方程式を差分化して得られる代数方程式は、非常に大規模になりがちであり、必要となる計算時間およびメモリ使用量を大幅に引き上げてしまう。したがって、行列計算の簡略化は極めて重要である。

本文書では、最も基本的な例題について、いくつかの反復解法のデモンストレーションを行なう。ここで対象とする問題は、与えられた行列 A およびベクトル $\vec{b}$ に対して、

$$A\vec{x} = \vec{b}$$

をみたすベクトル $\vec{x}$ を求めるというものである。反復解法とは、上の問題に対して、適当なベクトル $\vec{x}_0$ から出発して、何らかのアルゴリズムに従って、近似解ベクトルを $\vec{x}_1, \vec{x}_2, \cdots$ と改良していく解法である。

ベクトル空間の次元を 100 として、反復解法 BiCGStab, GPBiCG, GCR(m), Orthomin(m)を用いたときの結果を下に示す。(GCR(m)および Orthomin(m)のパラメータ m は 3,10,20 に設定している。) 横軸は反復回数 n であり、縦軸は残差の大きさ

$$|\vec{r}_n|^2 \qquad (\text{ただし、} \vec{r}_n \equiv \vec{b} - A\vec{x}_n)$$

である。解法によって、必要になる演算量（したがって計算時間）に差があり、問題に対して適切な解法を選択することの重要性がわかるだろう。

実際のシミュレータでは、このような反復解法を行なう前に、(不完全 LU 分解などの) 前処理を行なうことが多い。これによって、計算時間およびメモリ使用量を、さらに抑えることができる。