

有限要素法における最近の固有値問題解法

Recent Advances in Eigensolution Procedure in Finite Element Analysis

山 田 嘉 昭*・佐 藤 俊 雄*

Yoshiaki YAMADA and Toshio SATO

振動や動的応答の解析では、大次元の固有値問題に直面するのが普通である。この報告では有限要素法の分野で最近新しく開発された2つの有力な固有値解法、すなわち subspace iteration (または simultaneous iteration) および Wilkinson-Gupta 法について各々の特徴を従来用いられてきた解法との関連において明らかにする。また subspace iteration については、数値実験を通じてその有力なことを実証する。二つの固有値解法により、有限要素法は、また新しい進歩の段階を迎えたものと考えられるのである。

1. ま え が き

構造物を設計するにあたり、その動的な性質を知るとは静的な性質を知ることと同様に重要である。そして動的な性質のうち、最も重要なものは構造物の低次の固有振動数および固有モード (あわせて固有ペアという) であろう¹⁾。有限要素法を振動の問題に適用する場合、固有ペアは次の形の固有値問題

$$\omega^2[M]\{x\} = [K]\{x\}$$

の解として得られる。ここに $[M]$ と $[K]$ はそれぞれ質量マトリックスおよび剛性マトリックス、 ω^2 と $\{x\}$ は固有値と固有ベクトルのペアである。

線形振動においては、粘性減衰を考える場合にも、モードダンピングを仮定すると、固有ペアを利用することにより、 n 自由度系の振動方程式が最終的に各モードごとの1自由度系の振動方程式に帰着される²⁾。さらに振動波形は一般に低次モードの和として十分に表現されるので³⁾、固有値解析は、直接積分によって解を得ることが困難な大次元の問題にも適用できるならば便利である。しかしながら、固有値解析には、大次元のマトリックスから、必要とする低次のいくつかの固有ペアを求めるための有効で信頼性のある解法が存在しなかった点に問題があり、いままでもより効果的な解法を追求する研究が行われてきた⁴⁾。

最近、この問題点を克服する非常に有効な2つの方法が開発された。その1つは、Bathe⁵⁻⁶⁾、Jennings^{7,8)} 等によって開発された subspace iteration (または simultaneous iteration)、もう1つは、Wilkinson^{9,10)}、Gupta^{11,12)} 等によって開発された Sturm 列に基礎をおく方法 (以下 Wilkinson-Gupta 法と呼ぶ) である。2つの方法はいずれも有限要素法で得られる剛性および質量マトリックスの正定値対称性、バンド性を効果的に利用しており、少ない計算時間および記憶領域により、前者では低い方あるいは問題によっては高い方から数次の、後

者では必要とする任意の次数の範囲における固有ペアを求めることが可能である。特に前者の subspace iteration は、大次元で比較的広いバンド幅を持つマトリックスを電子計算機の補助記憶装置を使って解く場合に有効である。後者の Wilkinson-Gupta 法は、上で述べたように任意の次数範囲の固有ペアを求めることができる点では前者に比べて一般性があるが、大次元ではあっても、計算機の主記憶装置内に入るような狭いバンド幅を持つマトリックスの場合でないと、かなりの計算時間が必要となる。この解説では、subspace iteration 法を主体として、いままでに発表されている各種固有値問題解法との関係、また実際に解を求めた具体例や経験について述べることにする。subspace iteration 法に重点をおいたのは、それが Wilkinson-Gupta 法に比べて、大次元の問題にとくに適用が容易と考えられるからである⁴⁾。

2. 振動問題の固有値解析^{3),9)}

構造物の動的問題を有限要素法を用いて定式化すると、次のようなマトリックス形の運動方程式が得られる。

$$[M]\{\ddot{x}_0\} + [C]\{\dot{x}_0\} + [K]\{x_0\} = \{p_0\} \quad (1)$$

ここで $[M]$, $[C]$ および $[K]$ はそれぞれ質量、減衰および剛性マトリックスを表わし、 $n \times n$ の次元または自由度を持つものとする。 $\{x_0\}$ は変位ベクトル、 $\{\dot{x}_0\}$ と $\{\ddot{x}_0\}$ はそれぞれ速度および加速度ベクトル、 $\{p_0\}$ は外力ベクトルである。これらのベクトルは、いずれも $n \times 1$ の次元を持つ。最初に減衰および外力項のない問題を考えると、式(1)は

$$[M]\{\ddot{x}_0\} + [K]\{x_0\} = \{0\} \quad (2)$$

式(2)は、振動の問題では自由振動の方程式となっている

$$\{x_0\} = \{x\}e^{j\omega t}, \quad (j = \sqrt{-1})$$

とおけば、次の方程式が得られる。

$$\omega^2[M]\{x\} = [K]\{x\} \quad (3)$$

式(3)は一般固有値問題と呼ばれている方程式であり、その解として得られる固有ペアを $[\Omega^2]$, $[\Phi]$ とすれば

* 東京大学生産技術研究所 第1部

$$[M][\Phi][\Omega^2] = [K][\Phi] \quad (4)$$

ただし $[\Phi]$ はモーダルマトリックスで、固有ベクトル $\{\phi_i\}$ を列方向に並べた

$$[\Phi] = [\phi_1 \ \phi_2 \ \dots \ \phi_i \ \dots]$$

を表わすが、ここでは全体で n 個の固有ベクトルの中から、低次の $m(m \ll n)$ 個をとり、したがって $n \times m$ のマトリックスとなっている。同様に、 $[\Omega^2]$ は固有値を対角項とする $[\Omega^2] = \text{diag}(\omega_i^2)$ を表わすが、ここでは $m \times m$ の対角マトリックスに低い方から m 次の固有値が並んでいるものとする。このように、固有値問題の次元を元の $n \times n$ の空間から $m \times m$ の部分空間 (subspace) に減少させるのが、subspace iteration の 1 つの特徴である。

上記のモーダルマトリックス $[\Phi]$ を底とした変換により、元の運動方程式の振動変位解 $\{x_0\}$ は次のように表わされるものとする。

$$\{x_0\} = [\Phi]\{u\} \quad (5)$$

ただし $\{u\}$ は、subspace 内での一般化変位ベクトルを表わし、 $m \times 1$ の次元を持つ。ここで、一般の振動の場合を考え、式(5)を式(1)に代入し、さらに $[\Phi^T]$ を前から掛けると

$$[\Phi^T][M][\Phi]\{u\} + [\Phi^T][C][\Phi]\{u\} + [\Phi^T][K][\Phi]\{u\} = [\Phi^T]\{p_0\} \quad (6)$$

$[\Phi]$ を $[M]$ -直交に正規化すれば

$$[\Phi^T][M][\Phi] = [I_m]$$

および

$$[\Phi^T][K][\Phi] = \text{diag}(\omega_i^2)$$

の関係が成立する。ただし、 m 次元に縮小された固有値問題を考えているので、 $[I_m]$ は $m \times m$ の単位マトリックスを表わす。さらに、モーダルダンピングを仮定すると、 ξ_i を i 次モードの臨界減衰比として

$$[\Phi^T][C][\Phi] = \text{diag}(2\xi_i\omega_i)$$

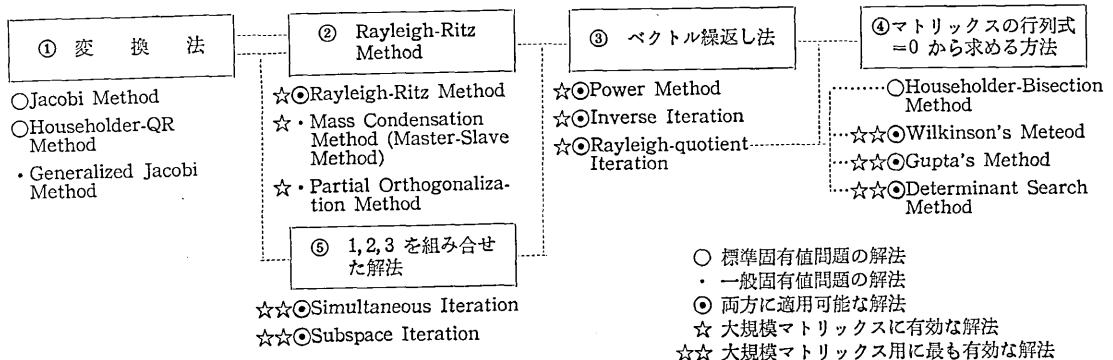
こうして、外力ベクトルについても

$$[\Phi^T]\{p_0\} = \{q\}$$

とおけば、式(6)は次に示す m 個の 1 自由度系の方程式を表わすことになる。

$$\ddot{u}_i + 2\xi_i\omega_i\dot{u}_i + \omega_i^2u_i = q_i, \quad i=1, 2, \dots, m \quad (7)$$

表 1 実対称マトリックスの固有値解法



固有値解析を振動問題に応用する場合の最大の利点は、上の式(5)や式(7)で示されるように、低い方から適当に m 個のモードをとって、必要な範囲の振動波形を精度よく表わすことができる点であろう。

さらに、過渡的な動的応答の問題を解く場合には、一般にはデュアメル積分を使うことなく、式(7)に対してたとえば Newmark の β 法などを適用するのであるが、そのときの数値積分の正確さおよび安定性は、時間刻み Δt の大きな影響を受ける。しかし、式(7)のように各固有モードに分解する方法によれば、各モードごとに異なる時間刻み Δt を選択して数値積分できることになるので、固有値解析は振動のみでなく過渡応答問題を解く上にも有利であることがわかる³⁾。

3. 固有値問題解法

いままでに発表された固有値問題解法は大きく分類すると、表1のようになる。ただし、ここで標準固有値問題を

$$[A]\{x\} = \lambda\{x\} \quad (8)$$

一般固有値問題を

$$\omega^2[M]\{y\} = [K]\{y\} \quad (9)$$

の形に定義するものとする。標準固有値問題での $[A]$ は対称マトリックス、一般固有値問題でのマトリックス $[M]$ と $[K]$ には一般に対称性のほかに少なくともどちらか 1 つは正定値であるという条件が課せられるものとする。一般固有値問題から標準固有値問題への変換は、 $[M]$ が分布形質量マトリックス (consistent mass matrix) の場合、以下のような手続きで行なうことができる。最初に $[K]$ は正定値対称であるから、次の形に Cholesky 分解することができて

$$[K] = [L][L^T] \quad (10)$$

ただし $[L]$ は左下三角マトリックス、 $[L^T]$ はその転置を表わす。ここで

$$\{y\} = [L^T]^{-1}\{x\} \quad (11)$$

とおくと、式(9)から

$$[L]^{-1}[M][L^T]^{-1}\{x\} = [A]\{x\} = \frac{1}{\omega^2}\{x\} \quad (12)$$

$$\left. \begin{array}{l} \rightarrow 2. \quad X_{k+1}'' = [M]X_k \\ \downarrow \\ 3. \quad [K]X_{k+1}' = X_{k+1}'' = [M]X_k \\ \downarrow \\ 4. \quad X_{k+1} = X_{k+1}' R_{k+1}^{-1} \end{array} \right\} \quad (20)$$

ただし

$$\left. \begin{array}{l} [B_{k+1}] = X_{k+1}'^T [M] X_{k+1}' \\ [B_{k+1}] = [R_{k+1}]^T [R_{k+1}] \end{array} \right\} \quad (21)$$

上のアルゴリズムにおいて、 X_k, X_{k+1}' および X_{k+1}'' は $n \times m$ のマトリックスを表わし、一般に n 次元のマトリックスに対し m 個の最小固有ペアのみを必要とする時は、 $m \ll n$ のように m を選ぶ。式(20)ステップ2は $[M]$ に対するべき乗法のプロセス、ステップ3は $[K]$ に対する逆反復法 (inverse iteration) のプロセスである。ステップ1でマトリックス $[K]$ を LDL^T 分解しているため、このステップ3における逆反復法での無駄な計算が省略される。ステップ4は式(21)にみられるように、マトリックス $[B_{k+1}]$ の Cholesky 分解を使用した $[M]$ に対する固有ベクトルの直交化のプロセスである。以上により低い方から m 個までの固有モードが得られる。

ベクトル繰返し法のもう1つの流れには Rayleigh 商反復法があり、これは逆反復法に、Rayleigh 商による原点移動 (origin shift) を組み込んだ方法である。この方法は非常に収束が速いことを特徴とする反面、どの固有ペアに収束させるかの制御が困難である。しかし、すでに厳密な固有値が求められているときは、そこに原点移動することで、1回またはせいぜい2回の繰返しで対応する固有ベクトルを求めることが可能となる。したがってこの方法は、Wilkinson-Gupta^{11, 9-11)} 法のように、最初に正確な固有値を求めておき、次に固有ベクトルを求めるような方法の場合に適している。そのときに、固有ベクトル $\{x\}$ を求めるためのアルゴリズムは次のようになる。

$$([M] - \bar{\lambda}_i [K])\{x\}_{k+1} = l_k \{x\}_k \quad (22)$$

ここで $\bar{\lambda}_i$ は固有値 $1/\omega_i^2$ に対して得られた精度の良い近似を表わし、 l_k は固有ベクトル $\{x\}_{k+1}$ を正規化するための係数である。

3.3 Rayleigh-Ritz 法

Rayleigh-Ritz 法^{5), 6), 14)} は、大規模なマトリックスに対して低次または高次からいくつかの固有ペアを求めるために用いられる解法であり、べき乗法の場合と同様に、マトリックスの対称性、バンド性を利用することができる。この方法は近似的なモードが解っている場合、その非常に正確な解を与えることを特徴とするが、一方において近似モードとして用いるものの中に、モードの欠落等があれば精度の悪い解しか与えないことになる。

Rayleigh-Ritz 法のもう1つの大きな特徴は、次のようにモード分離の性質がよいことである。すなわち、もし近似として選んだ m 個の一般化座標 X_{k+1}' が、 m 次までの厳密な固有モードの和 (一次結合) の形で表示さ

れるというような意味で近似の高いものであれば、 X_{k+1}' それ自体が直接に厳密な固有ベクトルに近いものでなくとも、Rayleigh-Ritz 法により X_{k+1}' から m 個の厳密なモードが分離して取り出されることである。このことから、Rayleigh-Ritz 法においては、いかに良い一般化座標を得るかが最も大きな関心事であり、mass-condensation 法、partial orthogonalization 法等多くの変形法が存在するが¹⁴⁾、ここでは以下で述べる subspace iteration への導入の目的で、Rayleigh-Ritz 法の原形について述べる。

Rayleigh-Ritz 法 (原形)

この方法では、各固有値 ω_i^2 が、Rayleigh 商 ρ の極値として与えられるという性質を用いる。一般固有値問題での Rayleigh 商は、解ベクトルを $\{v\}$ として、次のようである。

$$\rho(\{v\}) = \frac{{}_L v [K] \{v\}}{{}_L v [M] \{v\}} \quad (23)$$

ここで、 $\{v\}$ は $n \times 1$ の列ベクトル、 ${}_L v$ は対応する行ベクトルを表わす。いま、 $\{v\}$ を m 個の近似モード $\{x_i\}'$ の和として表わすものとすれば

$$\begin{aligned} \{v\} &= a_1 \{x_1\}' + a_2 \{x_2\}' + \dots + a_m \{x_m\}' \\ &= X'_{k+1} \{a\} \end{aligned} \quad (24)$$

ただし

$$\left. \begin{array}{l} X_{k+1}' = [x_1]' [x_2]' \dots [x_m]' \\ {}_L a_j = [a_1 \ a_2 \ \dots \ a_m] \end{array} \right\} \quad (25)$$

上の式で定義した X_{k+1}' は一般化座標であり、 $n \times m$ のマトリックスの形で表わされる。式(24)を式(23)に代入すると

$$\rho(\{v\}) = \frac{{}_L a_j X_{k+1}'^T [K] X_{k+1}' \{a\}}{{}_L a_j X_{k+1}'^T [M] X_{k+1}' \{a\}} \quad (26)$$

Rayleigh 商の極値条件 $\partial \rho(\{v\}) / \partial a_i = 0$ により、式(26)から

$$[K_{k+1}] \{a\} = \rho(\{v\}) [M_{k+1}] \{a\} \quad (27)$$

ただし

$$\left. \begin{array}{l} [K_{k+1}] = X_{k+1}'^T [K] X_{k+1}' \\ [M_{k+1}] = X_{k+1}'^T [M] X_{k+1}' \end{array} \right\} \quad (28)$$

m 個の一般化座標 X_{k+1}' の導入により、式(27)は元の次元 n から m に縮小された形の一般固有値問題となっている。これを解いて縮小された系における m 個の固有ベクトル

$$\{a_i\}, \quad i=1, \dots, m$$

を求め、式(24)に代入すると改善された近似モード $\{v_i\}$ を得る。また式(27)を解く過程で近似固有値

$$\rho(\{v_i\}) \approx \omega_i^2, \quad i=1, \dots, m$$

が求められる。ここで $\{x_i\}'$ の精度が十分であれば、すなわちはじめに述べたように $\{x_i\}'$ が個々の厳密な固有ベクトル $\{\phi_i\}$ に対する直接の近似でなく、 m 個の $\{\phi_i\}$ の一次結合で表わされるようなものであっても、以下の

ように、各モードが分離された形で求められる^{5),6)}。

$$\begin{aligned} \{v_1\} &= \{\phi_1\} && + \delta_1(\{\phi_{m+1}\} \cdots \{\phi_n\}) \\ \{v_2\} &= \{\phi_2\} && + \delta_2(\{\phi_{m+1}\} \cdots \{\phi_n\}) \\ &\vdots && \vdots \\ \{v_m\} &= \{\phi_m\} + \delta_m(\{\phi_{m+1}\} \cdots \{\phi_n\}) \end{aligned} \quad (29)$$

ここで $\delta_1, \dots, \delta_m$ は分離できなかった $(m+1)$ 次以上のモードを含む誤差の項である。

3.4 simultaneous iteration および subspace iteration

標題の simultaneous iteration と subspace iteration は、いずれもべき乗法と Rayleigh-Ritz 法を基礎とし、2つを組み合わせた解法であって、本質的には同じものと考えられるが、ここでは以下のように区別することにする。すなわち simultaneous iteration は本来、標準固有値問題を解くための解法であって、一般固有値問題でも標準固有値問題に変換した形で解くことを基本とする Jennings^{7),8),15)} や Brönlund¹⁶⁾ 流の解法を指すものとする。一方において、subspace iteration は一般固有値問題を直接に Rayleigh-Ritz 法的に解こうとする Bathe⁴⁻⁶⁾ や Dong¹⁷⁾ 流の解法を指す。いずれの解法も、厳密な固有ベクトルの近似解として Rayleigh-Ritz 法により分離された一般化座標の誤差をべき乗法で収束させ、その繰返しによって厳密解への非常に速い収束を得ようとするものである。このようにべき乗法を組み込めば、Rayleigh-Ritz 法を単独に用いる場合のように、一般化座標として近似のよいモードを選ぶ必要はなくなり⁹⁾、一方においてマトリックスのバンド性と対称性はそのまま利用することができるので、大次元の問題にも非常に有効な方法が得られるのである。

標準固有値問題の simultaneous iteration

解くべき問題は式(8)の $[A]\{x\} = \lambda\{x\}$ である。ここでは最大固有値からいくつかの固有ベアを求めるアルゴリズムを示す。

$$\begin{aligned} \rightarrow 1. & Y_k = [A]X_k \\ & \downarrow \\ 2. & [B_k] = X_k^T Y_k = X_k^T [A]X_k \\ & \downarrow \\ 3. & [Q_k]^T [B_k] [Q_k] = [A_k] \\ & \downarrow \\ 4. & X_{k+1}' = Y_k [Q_k] \\ & \downarrow \\ 5. & X_{k+1} = X_{k+1}' [R_{k+1}]^{-1} \end{aligned} \quad (30)$$

ただし

$$X_{k+1}'^T X_{k+1}' = [D_{k+1}], [D_{k+1}] = [R_{k+1}^T] [R_{k+1}] \quad (31)$$

ここで X_k, Y_k および X_{k+1}' は n 成分を有するベクトルが m 個ならんだ $n \times m$ のマトリックスを表わし、 $[B_{k+1}]$ は一般化座標 X_k によって、元の n 次元から m に縮小された $m \times m$ の固有値問題となっている。

式(30)のステップ1はべき乗法のプロセス、ステップ2~4は標準固有値問題に Rayleigh-Ritz 法を適用した

プロセスとなっていて、ステップ3で $[B_k]$ に対する固有値問題を解き、縮小された系での固有マトリックス $[Q_k]$ を求めている。 $[A_k]$ はこの系での固有値が対角部分に並んだ対角マトリックスである。式(30)におけるステップ5は数値安定化のため、Cholesky 分解を用いて行なう直交化のプロセスである。ステップ3の固有値解析は、標準固有値問題について縮小された系で行なうのであるから、Jacobi 法を適用することも可能であるが、Jennings⁷⁾ は固有ベクトル相互間の直交性、および十分収束した段階で $[B_k]$ が対角マトリックスに近くなることを利用して、次のような簡単な近似を用い、成功している。

すなわちマトリックス $[B_k]$ の成分を

$$[B_k] = (b_{ij})$$

とすれば、 $[Q_k]$ の成分 $[Q_k] = (t_{ij}^*)$ は

$$\left. \begin{aligned} t_{ij}^* &= 2t_{ij} / (1 + \sqrt{1 + 4t_{ij}^2/g^2}), \quad g \approx 0.5 \\ t_{ii}^* &= 1 \end{aligned} \right\} \quad (32)$$

ただし

$$t_{ij} = -b_{ij} / (b_{ii} - b_{jj}), \quad t_{ii} = 1$$

一般固有値問題の simultaneous iteration

一般固有値問題を simultaneous iteration で解くには、式(13)で示した置換

$$[A] = [L]^{-1} [M] [L^T]^{-1}$$

によって標準形になおした問題に、前項で述べた方法を適用すればよく、バンド性を崩さぬように定式化することが可能である。解くべき問題は式(9)で与えられ、解法のアルゴリズムを示せば以下のようである。

$$\begin{aligned} 1. & [K] = [L][L^T] \\ & \downarrow \\ \rightarrow 2. & [L^T]X_k = Y_k \\ & \downarrow \\ 3. & Z_k = [M]X_k \\ & \downarrow \\ 4. & [L]V_k = Z_k \\ & \downarrow \\ 5. & [B_k] = Y_k^T V_k \\ & \downarrow \\ 6. & [Q_k]^T [B_k] [Q_k] = [Q_k^{-2}] \\ & \downarrow \\ 7. & V_{k+1}' = V_k [Q_k] \\ & \downarrow \\ 8. & Y_{k+1} = V_{k+1}' [R_{k+1}]^{-1} \end{aligned} \quad (33)$$

ただし

$$[D_{k+1}] = V_{k+1}'^T V_{k+1}', [D_{k+1}] = [R_{k+1}^T] [R_{k+1}]$$

式(33)におけるステップ1は剛性マトリックス $[K]$ の Cholesky 分解、ステップ4で得られる V_k は

$$V_k = [L]^{-1} [M] [L^T]^{-1} Y_k = [A] Y_k$$

で式(30)におけるステップ1のべき乗法のプロセスに対応する。 $[K]$ および $[L]$ のバンド性を崩さないで用いるために、このような複雑なアルゴリズムとなっているのである。式(33)のステップ5~8は Rayleigh-Ritz 法および直交化の式で、式(30)におけるステップ2~5に対応する。ただし $[Q_k^{-2}]$ は対角部分に m 個の近似固有値 $1/\omega_i^2$ が並んだ対角マトリックス、 X_k, Y_k および V_k は

$n \times m$ のマトリックスである。

subspace iteration 法

解くべき問題は、一般固有値問題

$$\omega^2[M]\{x\}=[K]\{x\}$$

であり、これに対する subspace iteration 法のアルゴリズムを示すと次のようになる^{4-6), 17)}。

1. $[K]=[L][D][L^T]$
- ↓
2. $Y_k=[M]X_k$
- ↓
3. $[K]X_{k+1}'=Y_k=[M]X_k$
- ↓
4. $[K_{k+1}]=X_{k+1}'^T[K]X_{k+1}'=X_{k+1}'^TY_k$ (35)
- ↓
5. $[M_{k+1}]=X_{k+1}'^T[M]X_{k+1}'$
- ↓
6. $[K_{k+1}][\Phi_{k+1}]=[M_{k+1}][\Phi_{k+1}][\Omega_{k+1}^2]$
- ↓
6. $X_{k+1}=X_{k+1}'[\Phi_{k+1}]$

ただし X_k, Y_k および X_{k+1}' は $n \times m$ のマトリックスである。

式(35)のステップ1は剛性マトリックスの LDL^T 分解で、これはステップ3において、 X_{k+1}' を求めるときに必要となる。式(35)のステップ2と3は、べき乗法の式(20)におけるステップ2および3と同じである。次のステップ4はべき乗法で得られた X_{k+1} を一般化座標として用い、それにより固有値問題を縮小するプロセスである。ステップ5は、縮小された固有値問題の解で、Rayleigh-Ritz法の式(27)に対応している。ステップ6は式(27)での解として得られた各固有ベクトル $\{a_i\}$ を式(24)に代入することにあたる。 $[\Phi_{k+1}]$ は縮小された系での固有マトリックス、 $[\Omega_{k+1}^2]$ は近似固有値 ω_i^2 が対角部分に並ぶマトリックスである。

以下に4節で示す例題では、縮小された系の固有値問題の解法に、Bathe 等のように一般化 Jacobi 法を用いるのではなく⁵⁾、式(12)のように一度標準固有値問題に変換した後に、式(32)の Jennings⁷⁾ の式から得られる固有マトリックスの近似を用いる方法を取った。subspace iteration あるいは simultaneous iteration は、べき乗法と Rayleigh-Ritz 法を組み合わせたものであって、Rayleigh-Ritz 法の式(29)からも明らかのように、ある程度収束した段階における i 次固有ベクトルの収束率は $\omega_i^2/\omega_{m+1}^2$ であり^{5), 6)}、べき乗法を単独に用いる場合の収束率 $\max(\omega_{i-1}^2/\omega_i^2, \omega_i^2/\omega_{i+1}^2)$ に比べてはるかに優れている。このことから、同一値あるいは近接した固有値が存在する場合の収束の悪化も容易に克服される。求める固有ペアの数を q とするとき、Bathe 等は、縮小固有ベクトルの数 m として $m=\min(2q, q+8)$ を用いることを推奨している⁵⁾。

3.5 Wilkinson-Gupta 法

本項では前項で述べた subspace iteration および simultaneous iteration とならんで大規模な固有値問題のもう1つの解法である Wilkinson-Gupta 法^{1), 9-11)} に

ついて述べる。この方法は3つのプロセスからなり、それぞれ以下のような独立した役割を担っている。

- 1) スツルム関数列の性質(Sturm sequence property)により固有値の分離を行なう。
- 2) 2分割法(bisection 法)および線形内挿法により要求された精度にまで固有値を収束させる。
- 3) Rayleigh-quotient iteration により上記の固有値に対応する固有ベクトルを求める。

以下ではおのおのの機能について概要を説明する。

Sturm 関数列の性質

標準固有値問題において、Sturm 関数列の性質とは、 n 次の実対称マトリックス $[A]$ に対して、 λ を任意の数、 $[I]$ を n 次の単位マトリックスとして $[A]-\lambda[I]$ を考えると、 $f(\lambda)=\det([A]-\lambda[I])$ の1次から n 次に行列式(principle minor) 値間の符号変化の回数が、 $[A]$ の固有値の中で λ より小さいもの数に等しいことである。これに対し、一般固有値問題における Sturm 関数列の性質は、 $g(\lambda)=\det([M]-\lambda[K])$ の主小行列式値の符号変化の回数が、 λ より小さな固有値の数に等しい性質として定義される。ただし、一般固有値問題ではマトリックス $[M]$ または $[K]$ の少なくとも1つが正定値であることが要求されるが、構造工学の問題では、明らかにこの条件が満足されている。Sturm 関数列の性質を多くの λ について調べることにより、1つの区間ごとに1個の固有値しか存在しないように、固有値を分離することが可能となる。

主小行列式値を求める解法

上記分離のためには、主小行列式値を求める必要があるが、それは Gauss の消去法により容易に実行することができる。しかしマトリックス $[C]=[M]-\lambda[K]$ は必ずしも正定値ではなくなるので、数値不安定を除くためにピボットングを行なう。

マトリックスのバンド幅を $2b+1$ (半バンド幅 b) とするとき、実際の演算は、図1のように $(b+1) \times (2b+1)$ のマトリックス $[D]$ の中で行ない、順次 $[D]$ をずらしていく。こうして、 $[D]$ の対角項より左下の部分を零とするとともに、1から n 次までの主小行列式値を求めていくのである。ただし n は、マトリックス $[M], [K]$ および $[C]$ の次数を表わす。

いま、考えている主行列式の次数を $(k+1)$ 次とするとき、その主行列式値 $g_{k+1}(\lambda)$ を求めるためのアルゴリ

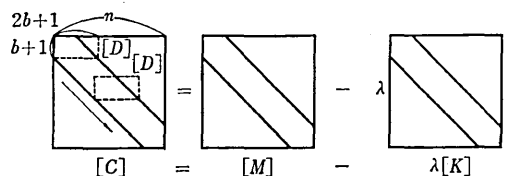


図1 マトリックス $[C]=[M]-\lambda[K]$ の主小行列式の値を求める方法

ズムは次のようである¹¹⁾。以下の計算を、 $i=1$ から k まで行なう。

1. $|C_{k+1,i}| > |C_{i,i}|$ ならば、 i 行と $(k+1)$ 行を入れ換える (ピボットイング)。
2. $m_{k+1,i} = C_{k+1,i}/C_{i,i}$ 、ここでステップ1でのピボットイングにより $|m_{k+1,i}| \leq 1$ である。
3. $(k+1)$ 行の各要素から、 $m_{k+1,i}$ に i 行の対応する要素を乗じて得られる値を差引く。
4. $g_{k+1}(\lambda) = (-1)^{S_{k+1}} C_{1,1} C_{2,2} \dots C_{k+1,k+1}$

ただし S_{k+1} は、 $(k+1)$ 次の $g_{k+1}(\lambda)$ を求めるまでに、それ以前に行なった行の入れ換え (ピボットイング) の回数である。

以上の計算は、図1に示したマトリックス $[D]$ の中で行ない、次数 $k+1$ が $b+1$ に達する段階までのものであるが、それ以後は、 $[D]$ を右下に一つづつずらして、同様の計算を行なえば、マトリックス $[C]$ の次数 n までの主小行列式値がすべて求められると同時に、 $[C]$ は右上3角マトリックスに変換される。この右上3角マトリックスは、各固有値に対応する固有ベクトルを求める際に使用するので、次に述べる λ を固有値に収束させる計算の段階では、記憶領域に保存することにする。

2 分割法および線形内挿法

Sturm 関数列の性質を用いて固有値が分離されたならば、まず2分割法 (bisection 法) によって固有値の範囲をさらに縮小し、次に線形内挿法を適用して、求める精度のところまで収束させる。この線形内挿の段階で、解がその存在範囲から飛び出すなどの不安定が起きたならば、ふたたび2分割法に戻る。2分割法は、とくに固有値の密集したところで有効である。線形内挿のための式は、図2を参照して

$$\mu_{k+1} = \mu_k + \alpha \frac{g(\mu_k)}{g(\mu_k) - g(\mu_{k-1})} (\mu_{k-1} - \mu_k) \quad (37)$$

図2のように常に一方向から内挿が行なわれる場合、通常の線形内挿法では $\alpha=1$ であるが、 $\alpha=2$ とした方が収束が速くなる。さらに重根の場合には、 α の値を増す

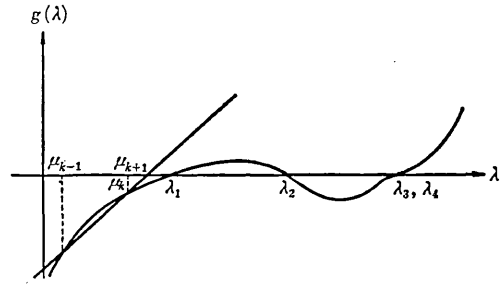


図2 特性方程式 $g(\lambda)$ の根の線形内挿

方法が用いられる⁹⁾。以上で固有値が要求する精度に求められたならば、Rayleigh 商反復法、すなわち式 (22) によって対応する固有ベクトルを求める。この場合、新しく式 (22) を解くのではなく、Sturm 関数列の性質を調べるときに用いた Gauss の消去法と一体として行なうと、後退代入だけで固有ベクトルが得られることになるので便利である。

4. 計算結果および考察

表2は、Householder-QR 法、subspace iteration, simultaneous iteration について行なった数値実験における計算時間の比較である¹⁰⁾。Householder-QR 法は subspace iteration に比較して、小次元のマトリックスの場合には有効であるが、マトリックスの次数が大きくなるに従って非効率的となる。simultaneous iteration は表3に示すマトリックス I についての標準固有値問題を解く場合のみに用い、他との厳密な比較はできないので、

表3 マトリックス I

$$\begin{bmatrix} N & N & \cdot & \cdot & \cdot & N & N \\ N & N-1 & \cdot & \cdot & \cdot & N-1 & N-1 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ N & N-1 & \cdot & \cdot & \cdot & 2 & 2 \\ N & N-1 & \cdot & \cdot & \cdot & 2 & 1 \end{bmatrix}$$

固有値の厳密解 $\lambda_i = \frac{1}{2} \left[1 - \cos \frac{(2i-1)\pi}{2N+1} \right]^{-1}$

表2 各固有値問題解法の計算時間の比較

番号	問題	システムの次元	バンド幅	質量マトリックス	求めた固有ベクトル数	解法	くり返回数	計算時間 (sec)
1	はり	59	full	consistent	15	Householder-QR 法	—	58
2	はり	60	full	consistent	60	Householder-QR 法	—	119
3	平板	40	full	consistent	6	Householder-QR 法	—	16
4	平板	40	18	consistent	10	subspace 法	15	40
5	平板	176	30	consistent	10	subspace 法	10	166
6	平板	225	33	consistent	10	subspace 法	10	240
7	マトリックス I	50	full	—	8	simultaneous iteration	15	17
8	マトリックス I	50	full	—	12	simultaneous iteration	15	29
9	アーチ	174	12	consistent	11	subspace 法	6	84
10	アーチ	354	12	consistent	11	subspace 法	8	234
11	フレーム	177	6	consistent	12	subspace 法	8	91

subspace 法: subspace iteration, 使用電算機 FACOM 230-55

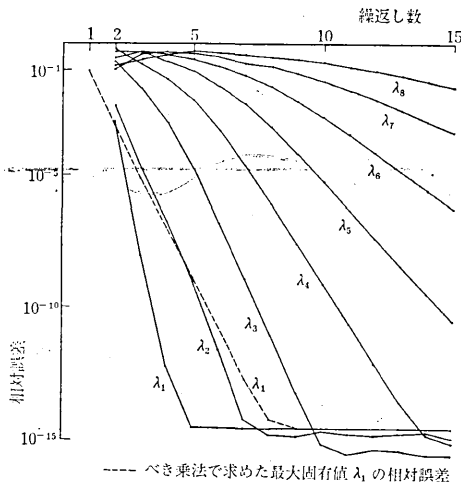


図3 Jennings の simultaneous iteration 法における収束の例. 表3のマトリックス I において $N=20$, $m=8$ とした場合. 倍精度計算

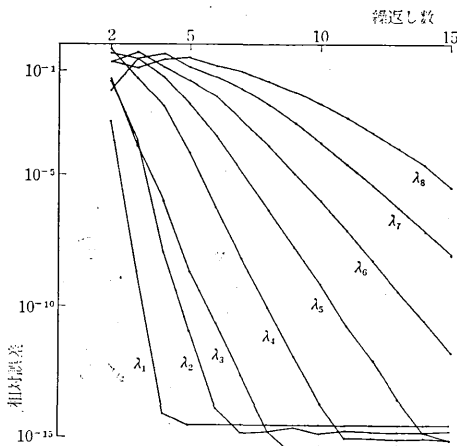


図4 一般化座標の数を $m=8$ から 12 に増したときの収束速度の改善

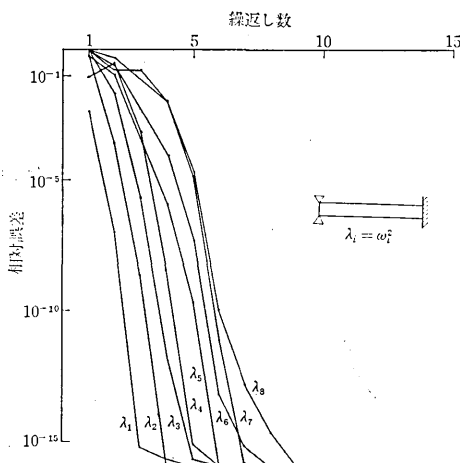


図5 subspace iteration 法の収束. 一端固定, 一端単純支持のりの固有振動数計算. 要素分割 50, 一般座標の数 $m=12$

ここではこれ以上に言及しない. subspace iteration 法では一般化座標の数を m として, 低い方から $n_k = m \times (2/3)$ で与えられる次数の固有値が, 反復における前段の固有値と 4 桁まで一致したとき, 収束と判定をしたが, ほぼ 6~8 回の繰返しで収束に達するのが普通である. また subspace iteration では, バンド幅が計算時間に直接の影響をそれほど与えないことも表 2 から理解できる. なお, 表 2 の各解法の計算はすべて, 電子計算機 FACOM 230-55 の主記憶装置内で行なった.

図 3 および図 4 は, 表 3 のマトリックス I に simultaneous iteration を適用し, Jennings の近似を用いた場合の収束の状況を描いたもので, 縦軸に相対誤差, 横軸に繰返し数を取っている. 図 3 の点線は, べき乗法で最大固有値 λ_1 を求めた場合の収束率で, simultaneous iteration の収束率がべき乗法に比べて優れていることがわかる. また, 一般化座標の数 m を図 3 での $m=8$ から, 図 4 のように $m=12$ に増すと収束が速くなる.

図 5 は一端固定, 他端単純支持はりを 50 要素に分割し, subspace iteration を適用して固有振動数を計算した場合の収束の状況を, 図 3 や図 4 と同様の方法で示した図である. 振動の問題では固有値が一般に良く分離されているので, 図 3 および図 4 で示した標準固有値問題の場合に比べて収束は速く良好となっている. なお, 図 3~図 5 の数値計算はすべて倍精度で行ない, いずれも 15 桁までの収束が得られた.

図 6 は Melosh¹⁹⁾ の長方形要素を用いて全縁単純支持正方形板の振動モードを subspace iteration によって解

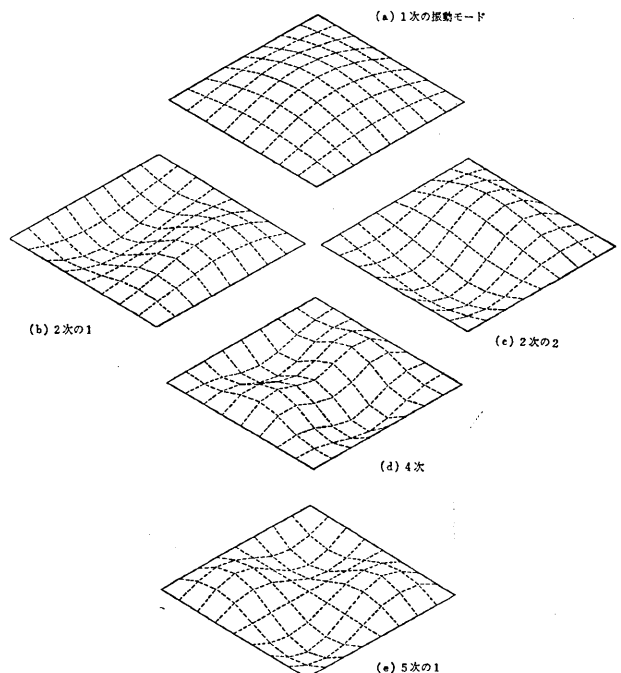


図6 subspace iteration による全縁単純支持正方形板の振動モードの解 (要素分割 8×8)

いて得た結果である。図の二つの2次振動モードに注目すると、この例のように、固有値に重根がある場合にも、固有モードの分離がよく行なわれることがわかる。以上から、subspace iteration, または simultaneous iteration は通常のべき乗法に比較して収束が速く、同一値の固有値すなわち重根の場合に べき乗法で出会う難点, すなわち収束が遅く、固有モードの分離が難しい点を克服した優れた解法であることが示されたと思う。

5. 結 語

有限要素法に固有値解法を組み込むことは、振動や動的応答問題の解析ばかりでなく、静的負荷の問題において、座屈など変形の幾何学的非線形性の影響を受ける問題の解析にきわめて有利である。とくに、この報告で述べたように、最近において subspace iteration や simultaneous iteration, あるいは Wilkinson-Gupta 法など、優れた固有値解法が開発されたことは、有限要素法の今後の発展に大きな寄与をなすものと考えられる。

(1974年4月1日 受理)

参 考 文 献

- 1) K. K. Gupta, "Vibration of frames and other structures with band stiffness matrix", *Int. J. Num. Meth. Eng.*, Vol. 2, 221-228 (1970).
- 2) O. C. Zienkiewicz and Y. K. Cheung, *The finite element method in structural and continuum mechanics*, McGraw-Hill (1967), 邦訳 マトリックス有限要素法, 培風館 (1970).
- 3) R. W. Clough and K. J. Bathe, "Finite element analysis of dynamic response," *Advances in Computational Methods in Structural Mechanics and Design*, Univ. of Alabama Press, 153-179 (1972).
- 4) K. J. Bathe and E. L. Wilson, "Solution methods for eigenvalue problems in structural mechanics", *Int. J. Num. Meth. Eng.*, Vol. 6, 213-226, (1973).
- 5) K. J. Bathe, "Solution methods for large generalized eigenvalue problems in structural engineering," SESM Rep., 71-20, Civ. Engng. Dept., Univ. of Calif., Berkeley (1971).
- 6) K. J. Bathe and E. L. Wilson, "Large eigenvalue problems in dynamic analysis", *ASCE, J.*, EM 98, 1471-1485 (1972).
- 7) A. Jennings, "A direct iteration method of obtaining latent roots and vectors", *Proc. Camb. Phil. Soc.*, Vol. 63, 755-765 (1967).
- 8) A. Jennings and, D. R. L. Orr, "Application of the simultaneous iteration method to undamped vibration problems," *Int. J. Num. Meth. Eng.*, Vol. 3, 13-24 (1971).
- 9) R. S. Martin and J. H. Wilkinson, "Solution of symmetric and unsymmetric band equations and the calculation of eigenvectors of band matrices", *Numer. Math.*, Vol. 9, 279-301 (1967).
- 10) G. Peters and J. H. Wilkinson, "Eigenvalues of $AX = \lambda BX$ with band symmetric A and B", *Comp. J.*, Vol. 2, 398-404 (1969).
- 11) K. K. Gupta, "Recent advances in numerical analysis of structural eigenvalue problems," *Theory and Practice in Finite Element Structural Analysis*, Proc. 1973 Tokyo Seminar on Finite Elem. Anal. (editors Y. Yamada and R. H. Gallagher), Univ. Tokyo Press, 249-271 (1973).
- 12) J. M. Ortega and H. F. Kaiser, "The LL^T and QR methods for symmetric tridiagonal matrices", *Comp. J.*, Vol. 6, 99-101 (1963).
- 13) 戸川隼人, マトリックスの数値計算, オーム社 (1971).
- 14) R. Uhrig, "Reduction of the number of unknowns in displacement method applied to kinetic problems," *J. Sound Vib.*, Vol. 4 (2), 25-33 (1966).
- 15) H. Rustishauser, "Computational aspects of F. L. Bauer's simultaneous iteration method", *Numer. Math.*, Vol. 13, 4-13 (1969).
- 16) O. E. Brönlund, "Eigenvalues of large matrices", *Symp. Finite Elem. Techn.*, Institute für Statik und Dynamik der Luft-und Raumfahrtkonstruktionen, Univ. of Stuttgart, 304-357 (1969).
- 17) S. B. Dong and J. A. Wolf, Jr., "On a direct-iterative eigensolution technique", *Int. J. Num. Meth. Eng.*, Vol. 4, 155-161 (1972).
- 18) 佐藤俊雄, "有限要素法における固有値問題解析とその応用", 東京大学大学院修士論文 (1974).
- 19) R. J. Melosh, "Basis for derivation of matrices for the direct stiffness method", *J. AIAA*, Vol. 1, No. 7, 1631-1637 (1963).