サ ブ ス ペ ー ス 法 の 高 速 化*
(第1報, 基礎検討)

畠 進**, 南方留美***

Enhancement of Subspace Iteration Method
(1st Report, Basic Study)

by Susumu HATAKE and Rumi MINAKATA

In this report, two procedures to enhance subspace iteration method are presented. One is the method of multiple condensation to lower eigenvectors during one step of iteration (Fig. 3). We call this method multicondensation subspace iteration method. The other is strategy about selection of starting vectors in origin shifted subspace iteration method (Fig. 5). Starting vectors are set to have desirable quality.

Key Words: Vibration, Numerical Analysis, Eigenvalue Analysis, Subspace Iteration Method, Origin Shift, Simultaneous Iteration Method

1. 緒 言

構造物の振動計算の中で固有値計算は重要な位置を占める。固有値問題の解法としては多くの方法が提案されている⁽¹⁾が、その中で、大規模の問題に対してサブスペース法⁽²⁾が有効であると考えられる。この方法の効率を向上させる努力が続けられており、特に求めるべき固有ベクトルの個数が多くなった時に原点移動を利用する方法⁽³⁾や、その時の同時逆反復に使用するベクトル数の最適値についての検討⁽⁴⁾が行われている。

本報では、サブスペース法を高速化するための二つの方法を提案し、その基礎的検討を行う。一つは、一回のイタレーション中に、低次固有ベクトルへの濃縮を複数回、繰返す方法で、多重濃縮サブスペース法と呼ぶことにする。他の一つは、原点移動を用いたサブスペース法での初期ベクトルの作成方法についての提案である。

2. 従 来 法

2.1 サブスペース法 これは、複数のベクトル

* 昭和59年10月16日 第62期全国大会講演会において普通講演として講演、原稿受付 昭和60年2月13日。

** 正員、(株)日立製作所機械研究所(〒300 土浦市神立町502)。

*** 准員、(株)日立製作所機械研究所。

に対し同時に逆反復を繰返す方法である。適当な方法で作成した q 個のベクトル (初期ベクトルと呼ぶ) を列ベクトルとする長方形マトリックス $[Y^{(0)}]$ (系の自由度を n とすれば n 行 q 列のマトリックス) に対し次の処理を考える。

$$[Y^{(k)}] = [K]^{-1}[M][Y^{(k-1)}] \dots\dots\dots (1)$$

$k \rightarrow \infty$ とすれば、 q 本のベクトルはすべて最小固有値に対応する固有ベクトルになってしまうのでよくない。そこで式(1)を単純に繰返すのではなく、式(1)で、 $[Y^{(k-1)}]$ から得られる $[Y^{(k)}]$ を $[\bar{X}_k]$ で表し、

$$[\bar{K}_k] = [\bar{X}_k]^T [K] [\bar{X}_k] \dots\dots\dots (2)$$

$$[\bar{M}_k] = [\bar{X}_k]^T [M] [\bar{X}_k] \dots\dots\dots (3)$$

で $[\bar{K}_k]$, $[\bar{M}_k]$ を計算する。この q 行 q 列の縮小された $[\bar{K}_k]$, $[\bar{M}_k]$ について、次の固有値問題を解く。

$$[\bar{K}_k][Q_k] = [\bar{Q}_k][\bar{M}_k][Q_k] \dots\dots\dots (4)$$

得られた q 行 q 列の固有マトリックス $[Q_k]$ を用いて、

$$[Y^{(k)}] = [\bar{X}_k][Q_k] \dots\dots\dots (5)$$

これが新しく得られた固有ベクトルの近似解である。これを式(1)に代入するということで、 k を1ずつ増やしながら式(1)~(5)を繰返せば、 $[Y^{(k)}]$ は低次の q 個の固有ベクトルに収束していく。ただし、最低次に近い固有ベクトルのほうが速く収束し、 q 番めのベクトルまで、収束させると、必要とするイタレーション

ン回数が多くなるので、求めたい固有ベクトルが p 個とした時に $q > p$ としておく。

式(1)～(5)は、実際のプログラムでは図1に示すような順で計算して必要のない計算を省いている。

2.2 原点移動付サブスペース法 図1④～⑦のステップは q^2 または q^3 に比例して演算数が増えていくので、必要とする固有ベクトルの個数 p が多くなると、④～⑦の計算時間の割合が多くなってきて固有値計算全体の計算時間が急激に増加する。これを避けるために原点移動を利用して、元の固有値問題

$$[K]\{\phi\} = \omega^2[M]\{\phi\} \cdots \cdots \cdots (6)$$

の代わりに、次の固有値問題を解く。

$$[K^*]\{\phi\} = \omega^{*2}[M]\{\phi\} \cdots \cdots \cdots (7)$$

ただし、

$$[K^*] = [K] - \mu_s[M], \omega^{*2} = \omega^2 - \mu_s$$

μ_s が原点移動量である。スツルム列の性質を利用して固有値を求めるべき範囲をいくつかの区間に分け、その区間内にある固有値の個数を調べておき、シフト点をその区間の中心に持って行って式(7)を解く。式(7)に図1のサブスペース法を適用すれば、 μ_s に近い固有値に対応する固有ベクトルから順に収束していく。この方法を用いれば同時逆反復のベクトルの個数 q を小さくできる。

3. 提案する手法

3.1 多重濃縮サブスペース法 必要とする固有ベクトルの個数 p が増えてきた時、図1のイタレーションで同時に反復する固有ベクトルの個数 q も大きくする必要がある。その結果、上で述べたように、固有値計算全体の計算時間も急激に増加する。ところで、与えられたベクトルを低次の固有ベクトルに濃縮させ

るのは、式(1)のプロセスによるものである。式(2)～(5)は、全部のベクトルが最低次の固有ベクトルに収束してしまうのを、防止するための処理である。したがって、そのような不都合が生じる恐れがなければ、1回のイタレーション中に式(1)の処理を何回か行うのが効果的である。式(2)～(5)の演算数は q の二乗あるいは三乗に比例するのにに対し、式(1)の処理の演算数は q に比例するだけである。

式(1)の処理を1回のイタレーション中に、2回以上、行う場合の留意点を図2を用いて定性的に説明する。任意のベクトルは、その系の固有ベクトルを用いて

$$\{u\} = \sum_{i=1}^n c_i \{\phi_i\} \cdots \cdots \cdots (8)$$

と表せる。例として、自由度 $n=30$ の系について、反復に用いるベクトルの個数 $q=6$ とした時に、6個のベクトルの中の3番めのベクトルについて式(8)の c_i がどのような分布になるかを、図2の左側に示す。図2(a)は初期ベクトルについて示したもので、図2(b)はある程度、イタレーションをした後のものである。それぞれに対して濃縮を数回繰返した結果を、右側に示す。図2(a)の段階で濃縮を多数回実施すると、 q 個のうちのどのベクトルも最低次の固有ベクトル $\{\phi_1\}$ の成分 c_1 が大きくなって、 $\{\phi_1\}$ に平行に近くなるので、後で部分空間での固有値解析を行う時、けた落ちによる誤差が大きくなって不都合が生ずる可能性がある。したがって、この段階では少数回の濃縮にとどめるべきである。図2(b)の段階では、 $\{\phi_3\}$ の成分 c_3 が他の成分に比べて大きくなっているの、濃縮

Subspace iteration method

Establish starting vectors $\{Y^{(0)}\}$	①
Factorization of $[K]$	②
Solve $[K](\bar{X}_k) = \{Y^{(k-1)}\}$	③
Projection of $[K]$ to subspace $(\bar{K}_k) = (\bar{X}_k)^T(Y^{(k-1)})$	④
Projection of $[M]$ to subspace $(Y_k) = (M)(X_k)$ $(\bar{M}_k) = (X_k)^T(Y_k)$	⑤
Solve for Eigensystem $(\bar{K}_k)(Q_k) = (\bar{M}_k)(Q_k)$	⑥
Calculation of new eigenvectors $(Y^{(k)}) = (Y_k)(Q_k)$	⑦
Sturm sequence check	⑧
Error estimate	⑨

図1 サブスペース法の概略PAD

(a) 初期ベクトル

(b) 反復後

図2 多重濃縮

を繰返しても、 $\{\phi_1\}$ に平行には、なりにくい。また、 $\{\phi_1\}$ と $\{\phi_2\}$ の成分が大きくなっても、部分空間で固有値解析をして、直交化できるので成分を縮小できる。高次モードについては、濃縮で成分を小さくできる。

以上に説明した多重濃縮サブスペース法の概略PAD図を図3に示す。図1の③のステップを②～⑤に置き換えた。④の Q^2 は、既に求められている固有値の近似値を用いる。最初のイタレーションすなわち $k=1$ の時は、 Q^2 が求められていないので濃縮回数

図3 多重濃縮サブスペース法の概略PAD

図4 初期ベクトル

図5 原点移動付サブスペース法の概略PAD

NC=1にしている。次章の計算例では、

$$NC = \min(k, 3) \dots\dots\dots (9)$$

とした。

3.2 原点移動付サブスペース法における初期ベクトル作成方法 サブスペース法で用いる初期ベクトルで望ましい性質は、求めようとする範囲の固有ベクトルの成分を多く含んでいることである。図4(a)に示すように区間分けしたもののについて区間1から順に固有ベクトルを計算していくものとし、同時逆反復に用いるベクトルの個数 q を、その区間のイタレーションで求める固有ベクトルの個数 p の2倍にしておく。収束を速くするためにダミーに使うベクトルが $(q-p)$ 個すなわち p 個あることになる。区間1については、シフト点を零にして従来法で計算する。収束後の前半の p 個は区間1の固有ベクトルであり、後半の

表1 計算条件

	C.M.	P.M.		
Number of iteration	12	5		
Iteration number	1~12	1	2	3~5
Number of condensations	1	1	2	3
Number of required eigenvectors	22			
Size of subspace	30			

C.M.: Conventional method

P.M.: Presented method

表2 計算結果(多重濃縮サブスペース法)

	f(Hz)		Error norm	
	C.M.	P.M.	C.M.	P.M.
1	8.5		0.0000000094	0.0000000110
2	36.3		0.0000000005	0.0000000006
3	52.9		0.0000000002	0.0000000002
4	118.4		0.0	0.0000000001
5	148.0		0.0	
6	224.1		0.0	
7	227.2		0.0	
8	290.0		0.0	
9	307.8		0.0	
10	374.8		0.0	
11	433.8		0.0	
12	486.5		0.0	
13	561.2		0.0000000059	
14	593.8		0.0000000069	
15	604.3		0.0000000109	
16	660.3		0.0000000393	
17	726.3		0.0000003808	
18	785.6		0.0000033467	
19	813.2		0.0000082771	
20	815.9		0.0000144408	
21	971.5		0.0003575990	
22	1014.0		0.004956605	
CPU(s)	C.M. : 22.45 , P.M. : 13.16			

Element mesh(10×20)

Thickness $t=1\text{cm}$
 Young's modulus $E=205.8\text{GPa}$
 Poisson's ratio $\nu=0.3$
 Mass density $\rho=7.8 \times 10^{-6}\text{kg/mm}^3$
 Degree of freedom $n=660$
 Half band width $m=39$

図6 平板のモデルの諸元

表3 原点移動付サブスペース法の計算例(平板, 図6)

	No.1 (From 1st to 8th)			No.2 (From 9th to 16th)			No.3 (From 17th to 24th)		
Number of iterations until converge	7 times			5 times			4 times		
Number of iteration step for Fig.5⑨&⑩	6th 7th			3rd 5th			3rd 4th		
Shift point μ	$\mu_1 = 0$ (0 Hz)			$\mu_2 = 1.34 \times 10^7$ (582.69Hz)			$\mu_3 = 3.28 \times 10^7$ (911.72Hz)		
Eigen frequency f and error norm of eigenvector ϵ	No.	f (Hz)	ϵ	No.	f (Hz)	ϵ	No.	f (Hz)	ϵ
	1	8.51	0.0000000090	9	307.76	0.0000000035	17	726.26	0.0000000054
	2	36.35	0.0000000005	10	374.79	0.00000000376	18	785.63	0.00000000037
	3	52.87	0.0000000002	11	433.79	0.00000000329	19	813.22	0.00000000051
	4	118.37	0.00000000057	12	486.55	0.00000000349	20	815.91	0.00000000240
	5	148.03	0.00000000727	13	561.18	0.00000000000	21	971.50	0.00000000924
	6	224.06	0.0000025507	14	593.81	0.00000000000	22	1014.00	0.0000046224
	7	227.23	0.0000025433	15	604.30	0.00000000002	23	1061.23	0.0000362555
	8	290.02	0.0000893711	16	660.28	0.0000004375	24	1098.63	0.0005320361
CPUtime(s)	6.43			7.21			6.21		

μ 個が次区間2の初期ベクトルとして適当であることについては疑問の余地はない。これは、図4(b)のような分布となる。区間2用の初期ベクトルは q 個必要であり、残りの μ 個を定める必要があるが、これについて必ず満たさなければいけない条件は、既に定めた μ 個の初期ベクトルと一次独立なことである。この条件を満たすものとして収束直前の q 本のベクトルのうち後半の μ 個をとる。これは、図4(c)のような分布となる。これは、区間2の固有ベクトルの成分さえ除けば区間3の固有ベクトルの成分が卓越しているので、図4(b)のようなベクトルと同時に使えば、かなり良い初期ベクトルとなる。区間3用の初期ベクトルは区間2での計算の時に同様にして得られる。必要に応じ、既に求められている固有ベクトルと直交化させる。図5は、本手法による原点移動付サブスペース法の概略PADである。

4. 計算例

4.1 多重濃縮サブスペース法の計算例 図6の平板のモデルについて計算した。表1は計算条件である。低次の22個の固有ベクトルを求めることにし、その時、同時逆反復に用いるベクトルの個数を30とした。従来法では12回のイタレーションで収束した。本手法の各イタレーションでの濃縮回数は表1のとおりである。濃縮の延べ回数は、従来法と本手法はどちらも12回で等しくしている。表2は計算結果である。従来法と本手法の結果を比較すると固有振動数は一致しており、エラーノルムについては、低次のベクトルで小さな差があるだけで十分良く一致していると言える。この結果から、与えられたベクトルを低次の固有ベクトルに濃縮させるのは式(1)のプロセスに依るも

ので、式(2)~(5)は全部のベクトルが最低次の固有ベクトルに収束してしまうのを防止するための処理であることが確認できたと考える。

4.2 原点移動付サブスペース法の計算例 表3は、図6の平板のモデルについての計算結果である。このモデルについて、同時に反復するベクトルの個数 $q=16$ 、一区間で求める固有ベクトルの個数 $\mu=8$ として、24個の固有ベクトルを三つの区間に分けて計算した。本報で述べた初期ベクトルの作成方法を用いれば、収束するまでのイタレーション回数が、第2区間で5回、第3区間で4回と、少なくなることが確認できた。

5. 結 言

サブスペース法を高速化するための二つの方法を提案した。今回の検討により、その基礎となっている考え方が正しいことを確認できたと考える。現状ではパラメータの選び方によって解が求められないケースも少なくない。固有値解析手法については常に安定して解が求められることが重要である。ここで提案した手法についてさらに検討を進め数千元の自由度の問題に対しても安定して解が求められるように完成させていく予定である。

文 献

- (1) 例えば、戸川、有限要素法による振動解析、(昭50)、103、サイエンス社。
- (2) Bathe, K. J., *Int. J. Numer. Methods Eng.*, 6-2 (1973), 213.
- (3) Bathe, K. J. and Ramaswamy, *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, 23-3 (1980), 313.
- (4) Wilson, E. L. and Itoh, T., *Comput. Struct.*, 16-1-4 (1983), 259.