減衰を考慮した大規模固有値解析の求解アルゴリズム*

青山 裕司^{*1}, 矢川 元基^{*2}

Solution Algorithm of Large Scale Eigenvalue Analysis with Damping

Yuji AOYAMA^{*3} and Genki YAGAWA^{*3} Quintessa K. K. Queen's Tower A 7-707,
2-3-1 Minatomirai, Nishi-ku, Yokohama shi, Kanagawa, 220-6007 Japan

This paper presents a solution algorithm of nonlinear eigenvalue problem which occurs in an eigenvalue analysis of a structure with damping. The solution of nonlinear eigenvalue problems usually require operations of a complex matrix and complex vectors to generate Krylov subspace. The proposed algorithm is especially effective in terms of large scale analysis, because it does not use complex matrix nor complex vectors. Therefore, the number of operations and the size of memory used in the analysis is reduced. Furthermore, the accuracy of the solutions is confirmed to be satisfactory.

Key Words: Computational Mechanics, Structural Analysis, Finite Element Method, Eigenvalue Analysis, Vibration Analysis, Damping Matrix, Arnoldi Method, Hessenberg Matrix, LR Method

1. 緒言

近年、計算機及び数値解析技術の発展により複雑な現象をもシミュレーションすることが可能となってきた。これにより、有限要素法などによる計算機シミュレーションが実際の実験に置き換わる数値実験として実用的に用いられるようになってきた。また、これに伴って、工業製品の開発の現場でも計算機シミュレーションによる設計が幅広く活用されている。

筆者等は振動デバイスの設計のために、減衰を考慮しない大規模並列固有値解析の研究を進めてきた^①。固有値解析は構造物の振動特性を理解する上で必要なため、振動デバイス以外でも機械部品、建築物などの設計にも広く用いられている^②。減衰を考慮しない大規模な固有値解析のアルゴリズムとしては、正規直交系を生成して、大規模な固有値問題をこれによって構成される部分空間に射影して、小規

模な固有値問題に変換して解く方法が有効であり、このような手法のひとつである Lanczos 法により 100 万次元規模の解析を並列計算機上で実現した^③。

しかし、例えば振動デバイスの設計では減衰は電氣的には抵抗という形で現れ、デバイスの重要な特性のひとつとなるため、固有値解析において減衰を考慮することも重要である。固有値解析において減衰を扱う方法として、比例粘性減衰系と一般粘性減衰系が知られている^④。比例粘性減衰系の仮定のもとでは減衰行列は剛性行列と質量行列の線形和として与えられ、この場合、固有ベクトルは無減衰の場合と一致し、固有値のみを比例定数により変換することにより減衰を考慮した固有値解析を行うことが可能である。一方、局所的に減衰が発生するような系では一般粘性減衰系として取り扱う必要がある。一般粘性減衰系では非線形固有値問題（2次の固有値問題）を、2倍の次元数の標準固有値問題に変換して、複素固有値問題として解くことにより減衰を考慮した固有値解析を行うことが可能である。しかし、大規模な固有値解析において行列の次元数が2倍になり、かつ大規模な複素行列あるいはベクトルを必要とする手法は実用的でない。また、このような複素固有値及び固有ベクトルをもつ実行列の固有

* 原稿受付 2001年2月21日。

^{*1} 正員、(株)クインテッサジャパン(〒220 6007 横浜市西区みなとみらい2-3-1クイーンズタワーA7階707区)(元：東洋通信機(株))。^{*2} 正員、東京大学大学院工学系研究科(〒113 8656 東京都文京区本郷7-3-1)。

E-mail: aoyama@quintessa.co.jp

値の計算方法について十分な議論がなされていないのが現状である。

本論文では、このような固有値問題の解法について考察を行った。その結果、大規模な固有値問題を小規模な問題に射影するための正規直交系を生成する過程では実ベクトルのみを用い、小規模な固有値問題に変換してから複素固有値問題として解くことが可能であり、実質的には無減衰の固有値問題と同程度の計算規模で任意の減衰行列を含む固有値解析が実施できることを実証した。また、得られる解の精度も他の手法と同等であることを確認したのでこれらについて報告する。

2 減衰行列を含む固有値解析

2.1 無減衰系 無減衰系の固有値解析は次の固有値問題に帰着される。

$$[K][x] + \lambda^2 [M][x] = 0 \quad (1)$$

ただし、 K は剛性行列、 M は質量行列、 $\lambda = j\omega$ で j は虚数単位、 ω は固有角振動周波数、 x は固有ベクトルである。この形の固有値問題は一般固有値問題とよばれ、行列の性質、規模、求めたい解の性質によって様々な解法がすでに知られている。構造物の固有値解析では一般に行列の規模が大きく、行列が実対称行列であり、かつ、いくつかの低次の固有値及びこれに対応する固有ベクトルが必要とされるので、質量行列が正定値行列の場合は対称行列の標準固有値問題に変換した後 invert Lanczos 法により、質量行列が非正定値対角行列の場合は非対称行列の標準固有値問題に変換した後 invert Arnoldi 法により解く手順が有効である⁹⁾。

2.2 比例粘性減衰系 比例粘性減衰系では減衰行列 C は比例定数 α と β を用いて次式のように与えられる。

$$[C] = \alpha[M] + \beta[K] \quad (2)$$

比例粘性減衰系の固有値解析は次の非線形固有値問題に帰着される。

$$[K][x] + \lambda[C][x] + \lambda^2[M][x] = 0 \quad (3)$$

式(3)に式(2)を代入すると

$$(1 + \beta\lambda)[K][x] + (\alpha\lambda + \lambda^2)[M][x] = 0 \quad (4)$$

を得る。この問題の固有ベクトルは減衰を含まない式(1)の固有値問題の固有ベクトルと一致し、固有値 λ は

$$\Lambda^2 = -\frac{\lambda^2 + \alpha\lambda}{\beta\lambda + 1} \quad (5)$$

となることが明らかである。ただし、 Λ は無減衰、すなわち式(1)の固有値である。

2.3 一般粘性減衰系 一般粘性減衰系では減衰行列 C は任意の形で与えられる。この場合、式(3)と自明である $M\lambda x + (-M\lambda x) = 0$ を組み合わせることによって次の固有値問題に変換することができる。

$$\begin{bmatrix} C & M \\ M & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \lambda x \\ \lambda^2 x \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} K & 0 \\ 0 & -M \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ \lambda x \end{bmatrix} = 0 \quad (6)$$

また、

$$\begin{bmatrix} \lambda x \\ \lambda^2 x \end{bmatrix} = \lambda \begin{bmatrix} x \\ \lambda x \end{bmatrix} \quad (7)$$

であるので、 $\begin{bmatrix} x^T & \lambda x^T \end{bmatrix}^T$ を固有ベクトルとする一般固有値問題を解くことによって解を求めることができる。式(6)の左辺の第2項行列の逆行列を左からかけて、式(7)を代入して整理すると、次の標準固有値問題に変換される。

$$\begin{bmatrix} -K^{-1}C & -K^{-1}M \\ I & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ \lambda x \end{bmatrix} = \frac{1}{\lambda} \begin{bmatrix} x \\ \lambda x \end{bmatrix} \quad (8)$$

ただし、 I は単位行列である。式(8)はベクトル内にも固有値 λ を含むが、通常固有値問題として解くことができる。しかし、式(8)の問題行列は実係数行列であるが、その固有値及び固有ベクトルは複素数を含むため、複素固有値問題として解く必要がある。この場合、次元数は式(1)の無減衰系あるいは式(4)の比例粘性減衰系の場合の2倍であり、しかも、複素数の演算が必要となるため、計算量及び必要メモリ量が大きくなり、特に大規模な解析では重大な問題となる。これを解決するために、次章では大規模な複素数行列あるいは大規模な複素数ベクトルを用いない求解アルゴリズムについて検討する。

3. 減衰を考慮した大規模固有値解析の求解アルゴリズム

3・1 べき乗法の複素固有値問題への適用

大規模な固有値問題の求解は問題行列を Krylov 列より生成される正規直交系により構成される部分空間に射影することによって小規模な固有値問題に変換して解く方法が有効である。一般粘性減衰系で導かれる標準固有値問題の問題行列は実行列であるが、その固有値及び固有ベクトルは複素数であり、また、互いに複素共役の関係にある固有値が対として含まれている。Krylov 列の性質はべき乗法の収束と同義であるので、本節ではこのような固有値問題に対してべき乗法が適用可能かを議論し、その結果を用いて大規模固有値問題の求解方法を考察する。

べき乗法のアルゴリズムを表 1 に示す。行列が実行列であって、固有値及び固有ベクトルが実数である場合には、初期ベクトルを実ベクトルとして反復を行うと $\tilde{\lambda}$ は絶対値最大固有値、 u はそれに対応する固有ベクトルに収束する。

しかし、行列が実行列であっても、固有値及び固有ベクトルが複素数である場合には、初期ベクトルを実ベクトルとすると一般に収束しない。さらに、絶対値最大の固有値も複素共役で存在するので、初期ベクトルを複素ベクトルとしても収束せず、固有値問題の周波数原点を虚軸方向に移動するなどの工夫が必要である。この場合、問題行列自体が複素行列となるため計算量、メモリ量が大幅に増大する。

いま、行列 A の絶対値最大で複素共役の関係にある 2 個の固有値を適当な実数 λ_R 、 λ_I を用いて $\lambda_R + j\lambda_I$ 、 $\lambda_R - j\lambda_I$ と記述すると、そのそれぞれに対応する固有ベクトルも互いに複素共役の関係にあるので適当な実ベクトル x_R 、 x_I を用いて $x_R + jx_I$ 、 $x_R - jx_I$ と置くことができる。十分な反復を繰り返した後、絶対値最大固有値に対応する固有ベクトル以外の固有ベクトルの成分は小さくなっているため、 i 回の反復の後に得られるベクトル u_i は、

$$\begin{aligned} u &= A^i(x_R + jx_I) + A^i(x_R - jx_I) \\ &= 2A^i x_R \quad \cdots (9) \\ u_i &= u/|u| \end{aligned}$$

と記述することができる。さらに、 $i+1$ 回の反復の後に得られた固有ベクトルは

$$\begin{aligned} u &= A^{i+1}(x_R + jx_I) + A^{i+1}(x_R - jx_I) \\ &= (\lambda_R + j\lambda_I)A^i(x_R + jx_I) + (\lambda_R - j\lambda_I)A^i(x_R - jx_I) \\ &= 2\lambda_R A^i x_R - 2j\lambda_I A^i x_I \\ u_{i+1} &= u/|u| \\ \cdots \cdots \cdots (10) \end{aligned}$$

と記述することができる。したがって、ベクトル u は反復により収束しないが、連続した 2 回の反復から得られるベクトル u_i と u_{i+1} は最大固有値に対応する固有ベクトルの成分である x_R と x_I を含みもつので、 u_i と u_{i+1} を直交化、規格化して得られる正規直交系 u_A 、 u_B により構成される部分空間に行列 A を射影して得られる次元数 2 の次の固有値問題を解くことにより互いに複素共役の関係にある絶対値最大の固有値を得る。

$$\begin{bmatrix} u_A^T \\ u_B^T \end{bmatrix} A \begin{bmatrix} u_A & u_B \end{bmatrix} y = \lambda y \quad \cdots \cdots \cdots (11)$$

ただし、 y は 2×2 個の固有ベクトルである。また、これに対応する行列 A の固有ベクトルは $[u_A \ u_B]y$ として得る。この概念は文献[4]にも記述されているが、厳密にはここで示したように u_i 及び u_{i+1} を規格化、直交化する必要がある。

実際の解析では固有値及びこれに対応する固有ベクトルを一つずつ求めるのでは効率が悪いので多数のベクトルにより構成される正規直交系を生成する必要がある。このために、表 1 のアルゴリズムを表 2 のように変更したアルゴリズムについて検討する。表 2 の手順では Lanczos 原理などによる正規直交系の生成の過程と同様に各ステップにおいて生成されたベクトルをすでに生成されているベクトルと直交化している。手順をこのように変形すると、上記の方法を用いても固有値及び固有ベクトルは収束しない。

以上の検討より、複素固有値及び固有ベクトルをもつ実行列 A に対してべき乗法をそのまま適用することはできないが、べき乗法によって生成されるベクトルを用いて複素固有値及び固有ベクトルを計算することは可能であるので、大規模な固有値問題の求解のための一連のアルゴリズムを次節で提案する。

Table 1 Algorithm of power method

1. select $u_0 = u/|u|$ for starting vector u
2. for $i=0, \dots$, until convergence do:
3. $u = Au_i$
4. $u_{i+1} = u/|u|$
5. $\tilde{\lambda}_{i+1} = u_{i+1}^T Au_{i+1}$
6. end for

Table 2 Algorithm of modified power method

1. select $u_0 = u/|u|$ for starting vector u
2. for $i=0, \dots$, until convergence do:
3. $u = Au_i$
4. $u = u - \sum_{k=0}^{i-1} (u \cdot u_k) u_k$
5. $u_{i+1} = u/|u|$
6. $\tilde{\lambda}_{i+1} = u_{i+1}^T Au_{i+1}$
7. end for

3. 2 大規模問題の求解アルゴリズム 表 3 に示す手順によって部分空間 V を構成する正規直交ベクトル系 v_i を生成する。まずノルムが 1 である初期ベクトルを決める。次に、式(8)の問題行列を A とおいて、これにベクトルをかけて、これまでに生成されているベクトルとの直交化を行って、最後に正規化することによって正規直交系を順に生成する。これら正規直交系により構成される部分空間 V により式(8)を

$$V^T \begin{bmatrix} -K^{-1}C & -K^{-1}M \\ I & 0 \end{bmatrix} VQ = \frac{1}{\lambda} Q \quad (12)$$

のように部分空間上に射影することによって、次元数 m の標準固有値問題に変換する。ただし、 Q は $m \times m$ の固有ベクトルである。正規直交基底ベクトル v_i を問題行列に合わせて分割して $[v_i^{1T} \ v_i^{2T}]^T$ と記述すると、

$$v_{i+1}^T = \left[\left(K^{-1} (Cv_i^1 + Mv_i^2) \right)^T \quad v_i^{1T} \right]^T \quad (13)$$

であるので 1 回の反復における演算量は無減衰の場合 ($v_{i+1} = K^{-1}Mv_i$) と比べてそれほど増大しない。このようにして得られた式(12)の左辺行列は一般に密実行列であるので、次の手順により上半ヘッセンベルグ行列に変換する⁹⁾。行列が第 r 行と第 $(r-1)$ 列まで上半ヘッセンベルグ行列の形に変換されているものとする、まず、

$$n_{ir}^{(r)} = \frac{k_{ir}^{(r)}}{k_{r+1,r}^{(r)}} \quad (14)$$

を計算して、第 $(r+1)$ 行に n_{ir} をかけたものを第 i 行から引き、第 i 列に n_{ir} をかけたものを第 $(r+1)$ 行に加える。この操作により、第 $(r+1)$ と第 r 列までが上半ヘッセンベルグ行列の形に変換される。したがって、この操作を $r=1$ から $r=n-2$ まで繰り返すことによって問題行列を上半ヘッセンベルグ行列に変換することができる。ただし k_{ir} は式(12)の左辺行列の第 i 行、 r 列要素である。

このようにして得られた上半ヘッセンベルグ行列を B とすると、 B の固有値は次の LR 法のアルゴリズムにより決定される⁹⁾。まず、初期行列 $B^{(0)} = B$ から始めて

$$B^{(i)} = L^{(i)} R^{(i)} \quad (15)$$

のように B を対角項がすべて 1 である下三角行列 $L^{(i)}$ と上三角行列 $R^{(i)}$ の積の形に分解する。次に、

$$B^{(i+1)} = L^{(i)} R^{(i)} \quad (16)$$

により $B^{(i+1)}$ を求めると、 $B^{(i)}$ と $B^{(i+1)}$ は互いに相似の関係にあり、このようにして求められる $B^{(i)}$ は上三角行列に収束するので、 B の固有値すなわち固有値問題(8)の固有値の近似値が対角要素として求められる。また、行列 A の固有ベクトルは、LR 法により求められた固有値を λ とすると、行列 A の固有値の原点を λ の近傍にシフトする、すなわち行列 $A - \lambda I$ に対して逆べき乗法を適用することによって求められる。このようにして求められた固有ベクトルを Q とすると、固有値問題(8)の固有ベクトルは VQ として得られる。上半ヘッセンベルグ行列への変換及び LR 法のアルゴリズムについては、数値的に安定なプログラムが文献[5]に掲載されている。本章の数値事例ではこのプログラムを適用した。

本手法は大規模な固有値問題を部分空間に射影する過程では実数のみを用いるため大規模な解析においては有効であると考えられる。さらに、アルゴリズムが無減衰系の固有値解析のアルゴリズムと手

順が類似しているため、解析システムの変更が極めて容易である。しかし、前節での検討のように、正規直交系の生成の過程で、各ステップにおいて生成されたベクトルとの直交化を行っているので収束解が得られるかどうかは、次章において数値例により示す。また、従来の方法との計算量及びメモリ量の比較についても次章にて検討する。

Table 3 Construction of orthonormal basis

1. select $v_1 = v/ v $ for starting vector v
2. for $i=2, 3, \dots, m$
3. $a_i = Av_{i-1}$
4. $b_i = a_i - \sum_{k=0}^{i-1} (a_i \cdot v_k) v_k$
5. $v_i = b_i/ b_i $
6. end for

4. アルゴリズムの検証

4・1 計算量、メモリ量の検討 本節では計算量及びメモリ量について検討を行う。解析モデルは寸法 0.10 x 0.30 x 1.00m の直方体を 10 x 30 x 100 個の 8 節点六面体要素に分割して端部を固定する。このときの行列の次元数は 102,300、行列のバンド幅は 1,062 となる。固有値解析の中で計算量が多いのは剛性行列を三角分解する過程と基底ベクトルを生成する過程である。表 4 にこれらの過程における演算数を、減衰を考慮しない場合、複素数演算を用いる従来の手法、複素数演算をなくした本論文での手法について示す。従来の手法では複素ベクトルを生成する過程での演算における計算量が多くなっているが、本手法では複素ベクトルの演算を行わないためこれらの過程における計算量は変化しない。したがって、全体の計算量の増大も極めて小さい。

次に、固有値解析の中で大きなメモリを使用するのは剛性行列と基底ベクトルである。表 5 にこれらを保存するために必要なメモリ量を、減衰を考慮しない場合、複素数演算を用いる従来の手法、複素数演算をなくした本論文での手法について示す。従来の手法では減衰を考慮しない場合の 2 倍の大きさのベクトルを複素数で記憶する必要があるためにメモリ量が多くなっている。これに対して本手法ではベクトルが実数であるためメモリ量が半分になっている。

Table 4 Number of operations

	Decomposition of matrix	Generation of basis vectors	Total
No dump.	57.5×10^9	21.7×10^9	79.2×10^9
Conv.	57.5×10^9	43.4×10^9	10.1×10^{10}
Proposed	57.5×10^9	21.7×10^9	79.2×10^9

Table 5 Memory size

	Stiffness matrix	Basis vectors	Total
No dumping	869 M	82 M	951 M
Conventional	869 M	328 M	1 197 M
Proposed	869 M	164 M	1 033 M

4・2 解の精度の検証 前節のモデルのヤング率を 2.127×10^{11} N/m²、ポアソン比 0.289、密度 7860 kg/m³ として固有値解析を行った。まず比例粘性減衰系として式(2)において $\alpha=1.0 \times 10^2$ 、 $\beta=0.0$ とした場合について、前章で示したアルゴリズムによる計算結果と無減衰による計算結果から式(5)により変換した結果との照合を行った。また、固有ベクトルの収束を評価するため、次式により得られる規格化誤差ノルムを用いた。

$$\text{規格化誤差ノルム} = \frac{|Kx + \lambda Cx + \lambda^2 Mx|}{|Kx|} \quad (17)$$

表 6 に第 1 次から第 5 次までの固有振動モードの無減衰、減衰を加えて式(5)より算出される理論値、解析により得られた値及び求められた固有ベクトルに対する規格化誤差ノルムを示す。ただし、正規直交系のベクトル数は 50 とした。減衰を加えて前章のアルゴリズムにより求めた固有値は無減衰として解析を行って、式(5)により変換した固有値と完全に一致する。また、固有ベクトルも十分な精度で得られている。

次に一般粘性減衰系の例として、モデルの端部にのみ式(2)において $\alpha=1.0 \times 10^4$ の減衰を加えた場合について計算を行った。表 7 に第 1 次から第 5 次までの固有振動モードの解析により得られた値及び求められた固有ベクトルに対する規格化誤差ノルムを示す。この場合、理論値を得ることができないので固有振動周波数の精度を議論することはできないが、規格化誤差ノルムが同程度であることから、同等の精度で解が得られていると考えられる。

また、図 1 (a)にモデルの概念図、(b)に境界条件及び端部減衰の概念図、(c)に無減衰あるいは比例粘性減衰の場合の振動変位、(d)に一般粘性減衰の

場合の変位をそれぞれ示す。図の(c)と(d)の変位は外観上は同じに見えるが、規格化誤差ノルムを用いて比較すると明らかに異なることを確認している。

Table 6 Result of the proportional viscous damping system

No	No dump.	Eq.(4)	Result by Computation	Error norm
1	j531.806	-50.000 $\pm j529.450$	-50.000 $\pm j529.451$	7.73×10^{-5}
2	j1494.336	-50.000 $\pm j1493.499$	-50.000 $\pm j1493.499$	6.65×10^{-5}
3	j3014.381	-50.000 $\pm j3013.966$	-50.000 $\pm j3013.966$	4.39×10^{-1}
4	j3186.262	-50.000 $\pm j3185.870$	-50.000 $\pm j3185.870$	5.30×10^{-5}
5	j7129.846	-50.000 $\pm j7129.671$	-50.000 $\pm j7129.671$	1.01×10^{-1}

Table 7 Result of the general viscous damping system

No.	Result by Computation	Error norm
1	$-100.211 \pm j523.529$	5.68×10^{-7}
2	$-94.374 \pm j1491.894$	3.03×10^{-6}
3	$-53.906 \pm j3014.411$	9.52×10^{-1}
4	$-95.373 \pm j3180.065$	2.53×10^{-5}
5	$-75.798 \pm j7128.087$	3.05×10^{-5}

Figure 1 (a)View of the model, (b)Schematic view of boundary conditions, (c)Eigenmode without damping, (d) Eigenmode with damping

5. 結論

任意の減衰行列を含んだ大規模固有値問題の求解アルゴリズムを提案した。この固有値問題は実行列であるが複素固有値及び複素固有ベクトルを解としてもつ。このような固有値問題を実ベクトルのみによる部分空間により小規模固有値問題に変換して、その後、複素固有値問題として処理しても解を得ることが可能で、解の精度も他の手法と同等であることを実証した。また、このときの計算量、必要なメモリ量は減衰を含まない場合より若干多くなる程度であり、減衰を考慮した大規模固有値解析が容易に実施できることを示した。さらに、大規模な行列とベクトルの演算を行う部分は減衰を考慮しない固有値解析のアルゴリズムと手順が類似しているため、プログラムの変更が極めて容易である。

従来、振動における減衰は原理的にも十分な解明が行われておらず、また、減衰を考慮した固有値解析は計算が複雑であるという理由で実用的には比例粘性減衰系での解析しか行われていなかったが、本研究の結果、任意の減衰行列を含む固有値問題が減衰を含まない固有値問題と同等のアルゴリズムで、かつ、計算規模をほとんど増大させることなく解けることがわかり、今後、さまざまな要因による減衰が特性に及ぼす影響を解明する上でも重要な役割を果たすと期待される。

文 献

- (1) 青山裕司, 矢川元基, 平間宏一, 並列計算機による 100 万自由度振動解析, 日本機械学会論文集 C 編, 64 巻, 628 号, 1-6 (1998-12)
- (2) 加川幸雄, 有限要素法による振動・音響工学/基礎と応用, 培風館(1981)
- (3) 青山裕司, 矢川元基, 非正定値質量行列を用いた高精度大規模固有値解析, 日本機械学会論文集 C 編, 66 巻, 649 号, 1-6 (2000-9)
- (4) Z. Bai, J. Demmel, J. Dongarra, A. Ruhe and H. vanderVorst, editors, "Templates for the Solution of Algebraic Eigenvalue Problems: A Practical Guide.", SIAM, Philadelphia, 2000.
- (5) 大野豊, 磯田和男監修, 新版-数値計算ハンドブック, オーム社