東海大学紀要産業工学部３（2010年）11頁～18頁
Bull. School of Industrial Engineering Tokai Univ., 3 (2010) pp.11-18

ランチョス逆ベキ乗法によるスパース対称行列の中間固有解の一算定法

柏木 光博*

A Method for Determining Intermediate Eigensolutions of Sparse and Symmetric Matrices by Lanczos and Shifted Inverse Power Method

by
Mitsuhiro KASHIWAGI

(Received: October 2010, Accepted: February 2011)

Abstract

This paper presents a useful numerical calculation method based on the Lanczos and shifted inverse power method in the intermediate eigensolution of large sparse and symmetric matrices. The proposed method has a good accuracy and stability in a relatively small computational time. The obtained results agree well with the exact solutions in short CPU time. From these, the present method may be said to provide an efficient approach in the process of the Lanczos and shifted inverse power method.

１．はじめに

ICCG法やSCG法等の共役勾配法系の反復法(PCG法)[1,2,4,7,8,15,16,21]は，直接法に比べ主記憶領域を極めて少なくできるため，差分法や有限要素法などに見られる大次元でスパースな行列に対して有力な解析手段となる．有限要素法などのスパース性を大次元固有値問題に活かすためには，ベキ乗法系解法やランチョス法系解法などの反復法系解法[2,9,10,11,12, 13,14,16,17,18,19,20,21]に頼らざるを得ない．ベキ乗法[3,17]系解法は，固有値の小さい方あるいは大きい方からいくつかの固有対（固有値と対応する固有ベクトル）を求め得る．大次元スパース対称固有値問題に対して有効なランチョス法[2,6,17]やブロックランチョス法[5,6]は行列の３重対角化を可能とし，ベキ乗法系解法と同様に最小あるいは最大固有値近辺のいくつかの固有解を求め得る．リスタート・ランチョス法[2]は部分空間固有値問題を繰り返すことによって固有解を得る方法であり，現在では，最小あるいは最大固有値近辺のいくつかの固有対を求める問題に利用されている．ランチョス法などのKrylov部分空間に基づく反復法[2,18,20]に代わる有効な方法としてJacobi-Davidson法[19,20]があるが，対角優位性の弱い有限要素解析における固有値問題に対し効率がよくないことが示されている[21]．

ある物体にそれとは異なる物体を載せたり，繋いだりなどした場合，それぞれの物体の固有値がほぼ同じ時に共振状態になる可能性がある．その共振状態を避けるためには中間の固有値を知る必要があり，設計上の重要なチェックポイントとなる．逆ベキ乗法やサブスペース法およびリスタート・ランチョス法などの反復系解法は，最小固有値や最大固有値からいくつかの固有値を求める場合に有効であるが，任意の中間の原点移動点付近の固有値解析には解析不能や解の見落としを呈する．中間固有値を求める適切な方法がないので，小さい方から何百とか何千とかの固有解を求めているのが現状と思われる．固有値解析は非常に大きい計算負荷を伴うので，ある固有値近辺の固有解を多

* 産業工学部建築学科教授

くても何十か求めれば効率的な設計ができるものと思われる．

原点移動逆ベキ乗法は原点移動量を適切に設定すると，原点移動していない場合に比べ，収束を速くする効果を期待できる．古典的方法ではあるが，反復法系の原点移動逆ベキ乗法は，任意の中間の原点移動点付近の安定した固有値解析に有効な方法と思われる．ただし，最小固有値と最大固有値のほぼ中間の原点移動点付近の行列は特に悪条件となり，反復回数と計算時間は極端に多くなる．最近，柏木は共役勾配法系の反復法や原点移動逆ベキ乗法を利用しながら，大次元スパース行列で任意の中間のいくつかの固有解を求めるダブルシフト逆ベキ乗法を提案し[12,13]，SCG 法などの前処理を施した共役勾配法系の反復法を利用しながら，大次元スパース行列で特に任意の中間の固有解をいくつか求める場合に有効であることを示した．

リスタート Shift-invert Lanczos 法において，求める固有対を全て含んだ部分空間の固有値問題を繰り返し解いた著者の数値実験では，最小固有値付近の固有対をいくつか求める場合，あるいは最大固有値付近の固有対をいくつか求める場合に効果的であるが，ある中間固有値付近の固有対をいくつか求める時には解の見落としをする場合や仮定した最大反復回数内で求まらない場合が生じた．ここで提案する計算法は，ランチョス法に基づいてスパース対称行列の任意の中間の原点移動量付近の固有解を効率よく求めることを目的としている．この特徴は，ランチョス法による部分空間固有値問題を原点移動点に最も近い固有値の収束に特化することにより計算時間の短縮化と結果の安定性を保つことが出来ることである．特に係数行列の要素の単位が異なり，要素の絶対値の差が大きい場合に計算効率が高い結果を得た．提案法では，対象とする行列の原点移動点に最も近い固有値から順次計算できる．ダブルシフト逆ベキ乗法と同様に，SCG 法などの前処理を施した共役勾配法系の反復法を利用しながら，大次元スパース行列で特に任意の中間の固有解をいくつか求める場合に有効である．提案法で最大固有値から数個の固有解を求める場合も，逆ベキ乗法で最小固有値から数個の固有解を求める場合と同様に数値解析できるのも特徴である．

以下に，ランチョス逆ベキ乗法のアルゴリズムを述べ，標準固有値問題および一般固有値問題に関する数値実験により，提案法の有効性を示す．

２．ランチョス逆ベキ乗法のアルゴリズム

反復法系の中間固有値算定法は限られており，その中でも安定した解法は，シフト逆ベキ乗法とダブルシフト逆ベキ乗法であることを柏木は示した[12,13]が，様々な工夫を施した提案のランチョス逆ベキ乗法は上述のダブルシフト逆ベキ乗法と同程度かそれ以上の解法である．ここでは，シフト逆ベキ乗法とダブルシフト逆ベキ乗法および提案のランチョス逆ベキ乗法のアルゴリズムの詳細を示す．これらのアルゴリズムにより数値実験を行った．

A は $n \times n$ 実対称行列（剛性行列），B は $n \times n$ 正定値対称行列（質量行列あるいは幾何剛性行列），λ は固有値，x は対応する固有ベクトル，λ_0 を原点移動量とすると，一般固有値問題は，$[A-\lambda_0 B]x = (\lambda-\lambda_0)Bx$ のように表せる．標準固有値問題では，$B = I$（単位行列）とおけば良い．

2.1 シフト逆ベキ乗法

(1) $\ell = 0$

初期ベクトル $x^{(0)}$ を一様乱数によって生成する．最大反復回数を設定する．グラム・シュミットの方法により，既に得られた i 個の固有ベクトル ϕ の抜き取りと正規化および初期近似固有値を次式で求める．

$$\tilde{x}^{(0)} = x^{(0)} - \sum_{j=1}^{i} (x^{(0)^T} B\phi_j)\phi_j \ ,$$

$$x^{(0)} = \tilde{x}^{(0)} \Big/ (\tilde{x}^{(0)^T} B\tilde{x}^{(0)})^{\frac{1}{2}} \ , \quad \lambda^{(0)} = x^{(0)^T} A x^{(0)}$$

(2) $\ell = 1, 2, \cdots$

シフト逆ベキ乗法による反復計算を行う．

① ℓ 反復時での $x^{(\ell)}$ は，$x^{(\ell)} = [A-\lambda_0 B]^{-1} Bx^{(\ell-1)}$ によって求める．グラム・シュミットの方法により，既に得られた固有ベクトルの抜き取りと正規化および近似固有値を次式で求める．

$$\tilde{x}^{(\ell)} = x^{(\ell)} - \sum_{j=1}^{i} \left(x^{(\ell)^T} B\phi_j \right) \phi_j \ ,$$

$$x^{(\ell)} = \tilde{x}^{(\ell)} \Big/ (\tilde{x}^{(\ell)^T} B\tilde{x}^{(\ell)})^{\frac{1}{2}} \ , \quad \lambda^{(\ell)} = x^{(\ell)^T} A x^{(\ell)}$$

② 収束判定を行う．最大反復回数（本数値実験では $\ell_{\max} = 100000$）を超えたら計算をストップ．ε_1 と ε_2 を収束判定値とすると

$$\left| \frac{\lambda^{(\ell)} - \lambda^{(\ell-1)}}{\lambda^{(\ell)}} \right| < \varepsilon_1 \quad （本数値実験では \varepsilon_1 = 10^{-14}）$$

あるいは，残差ベクトル：$r^{(\ell)} = A\,x^{(\ell)} - \lambda^{(\ell)} Bx^{(\ell)}$ を計算し

$$\frac{\left\| r^{(\ell)} \right\|}{\left\| A\,x^{(\ell)} \right\|} < \varepsilon_2 \quad \text{（本数値実験では}\varepsilon_2 = 10^{-8}\text{）}$$

であれば収束．次の固有値を求める場合，(1)に戻るが，求めない場合，(3)へ．収束していない場合，(2)の①に戻る．

(3) 最後に，求められた全ての固有値と固有ベクトルに対して，固有値と固定原点移動量λ_0との差の絶対値が小さい方から順に並び替えを行う．

2.2 ダブルシフト逆ベキ乗法

(1) $\ell = 0$

初期ベクトル$x^{(0)}$を一様乱数によって生成する．最大反復回数を設定する．グラム・シュミットの方法により，既に得られたi個の固有ベクトルϕの抜き取りと正規化および初期近似固有値を次式で求める．

$$\tilde{x}^{(0)} = x^{(0)} - \sum_{j=1}^{i} (x^{(0)T} B\phi_j)\phi_j \ ,$$

$$x^{(0)} = \tilde{x}^{(0)} \Big/ (\tilde{x}^{(0)T} B\tilde{x}^{(0)})^{\frac{1}{2}} \ , \quad \lambda^{(0)} = x^{(0)T} A x^{(0)}$$

(2) $\ell = 1,\ 2,\ \cdots$

① ℓ反復時での$x^{(\ell)}$は$x^{(\ell)} = [A - \lambda_0 B]^{-1} B\,x^{(\ell-1)}$によって求める．グラム・シュミットの方法により，既に得られた固有値ベクトルの抜き取りと正規化および近似固有値を次式で求める．λ_0は初期原点移動量のままである．

$$\tilde{x}^{(\ell)} = x^{(\ell)} - \sum_{j=1}^{i} \left(x^{(\ell)T} B\phi_j \right)\phi_j \ ,$$

$$x^{(\ell)} = \tilde{x}^{(\ell)} \Big/ (\tilde{x}^{(\ell)T} B\tilde{x}^{(\ell)})^{\frac{1}{2}} \ , \quad \lambda^{(\ell)} = x^{(\ell)T} A x^{(\ell)}$$

② 原点移動（シフト）判定を行う．最大反復回数（本数値実験では$\ell_{\max} = 30000$）を超えたら計算をストップ．

$$\left| \frac{\lambda^{(\ell)} - \lambda^{(\ell-1)}}{\lambda^{(\ell)}} \right| < \varepsilon_e$$ であれば逐次原点移動量$\lambda_0^{(1)}$を求め(2)の③へ．満足しなければ(2)の①に戻る．ここに，ε_eは固有値の同次シフト時相対誤差値であり，

本数値実験では，$\varepsilon_e = \min\left(10^{-1}/(\lambda_0 + 1), 10^{-5}\right)$とした．

ただし，前の反復時に(2)の③の収束判定値を満足していれば固有値の同次シフト時相対誤差値の判定は必要としない．

③収束判定を行う．ε_1とε_2を収束判定値とすると

$$\left| \frac{\lambda^{(\ell)} - \lambda^{(\ell-1)}}{\lambda^{(\ell)}} \right| < \varepsilon_1 \quad \text{（本数値実験では}\varepsilon_1 = 10^{-14}\text{）}$$

あるいは，残差ベクトル：$r^{(\ell)} = A\,x^{(\ell)} - \lambda^{(\ell)} Bx^{(\ell)}$を計算し

$$\frac{\left\| r^{(\ell)} \right\|}{\left\| A\,x^{(\ell)} \right\|} < \varepsilon_2 \quad \text{（本数値実験では}\varepsilon_2 = 10^{-8}\text{）}$$

であれば収束．次の固有値を求める場合，(1)に戻るが，求めない場合，(3)へ．収束していない場合，以下の式によって$\lambda_0^{(\ell+1)}$を計算し，(2)の①に戻る．

$$\rho = \left| \lambda^{(\ell)} - \lambda^{(\ell-1)} \right| , \quad g = \left\{ r^{(\ell)} \right\}^T B^{-1} r^{(\ell)} ,$$

$$\beta^{(\ell)} = \rho g / \left(\rho^2 - g \right), \quad \lambda_0^{(\ell+1)} = \lambda^{(\ell)} - \beta^{(\ell)}$$

(3)最後に，求められた全ての固有値と固有ベクトルに対して，固有値と固定原点移動量λ_0との差の絶対値が小さい方から順に並び替えを行う．

2.3 ランチョス逆ベキ乗法

ランチョス法による３重対角化を第m段で打ち切った時，m個の基底ベクトルy_kを列とする$n \times m$行列$Y_m = [y_1, y_2, \cdots, y_m]$と，$m \times m$の３重対角行列

$$T_m = \begin{bmatrix} \alpha_1 & \beta_1 & & & \\ \beta_1 & \alpha_2 & \beta_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & & \beta_{m-1} \\ & & & \beta_{m-1} & \alpha_m \end{bmatrix}$$ が得られる．

以下に本論文で提案するアルゴリズムを示す．

(1) $\ell = 0$

初期ベクトル$x^{(0)}$を一様乱数によって生成する．最大反復回数を設定する．グラム・シュミットの方法により，既に得られたi個の固有ベクトルϕの抜き取りと正規化および初期近似固有値を次式で求める．

$$\tilde{x}^{(0)} = x^{(0)} - \sum_{j=1}^{i} (x^{(0)T} B\phi_j)\phi_j \ ,$$

$$x^{(0)} = \tilde{x}^{(0)} \Big/ (\tilde{x}^{(0)T} B\tilde{x}^{(0)})^{\frac{1}{2}} \ , \quad \lambda^{(0)} = x^{(0)T} A x^{(0)}$$

次に，$y_1 = x^{(0)}$とする．

(2) $\ell = 1, 2, \cdots$

部分空間シフト・ランチョス法による反復計算を行う．

① $\alpha_1 = y_1^T B[A-\lambda_0 B]^{-1} By_1$ （$[A-\lambda_0 B]^{-1} By_1$ の計算後，このベクトルから既に得られた i 個の固有ベクトル ϕ の抜き取りを行う），

$z_1 = [A-\lambda_0 B]^{-1} By_1 - \alpha_1 y_1$ ， $\beta_1 = \left(z_1^T Bz_1\right)^{\frac{1}{2}}$ ，

$y_2 = z_1 / \beta_1$ を計算する．

② $\alpha_k = y_k^T B[A-\lambda_0 B]^{-1} By_k$ （$[A-\lambda_0 B]^{-1} By_k$ の計算後，このベクトルから既に得られた i 個の固有ベクトル ϕ の抜き取りを行う），

$z_k = [A-\lambda_0 B]^{-1} By_k - \beta_{k-1} y_{k-1} - \alpha_k y_k$ ，

$\beta_k = \left(z_k^T Bz_k\right)^{\frac{1}{2}}$ を計算する．

③ ここで従来のランチョス逆ベキ乗法の計算過程に以下の計算手順を取り入れて，最小固有値から中間固有値をはさんで最大固有値まで安定した解が求められるアルゴリズムを考える．

k が計算個数 m （本数値計算では $m = 11$ ）に達すれば(2)の④へ．そうでなければ $y_{k+1} = z_k / \beta_k$ を計算し，(2)の②に戻る．

④ $T_m Q_m = Q_m \prod_m$ なる部分空間固有値問題をとく．ここに，Q_m は $Q_m = [q_1, q_2, \cdots, q_m]$ を，$\prod_m$ は $\prod_m = diag[\pi_1, \pi_2, \cdots, \pi_m]$ を表している．

⑤ $\lambda = \dfrac{1}{\pi} + \lambda_0$ ， $x = Y_m q$ により近似固有値，近似固有ベクトルを求める．求められた全ての近似固有値と近似固有ベクトルに対して，近似固有値と固定原点移動量 λ_0 との差の絶対値が小さい方から順に並び替えを行う．

⑥ 近似固有値と固定原点移動量 λ_0 との差の絶対値が最も小さい 1 番目の固有値に対して収束判定を行う．

$\left|\dfrac{\lambda^{(\ell)} - \lambda^{(\ell-1)}}{\lambda^{(\ell)}}\right| < \varepsilon_1$ （本数値実験では $\varepsilon_1 = 10^{-14}$ ）

あるいは残差ベクトル：$r^{(\ell)} = Ax^{(\ell)} - \lambda^{(\ell)} Bx^{(\ell)}$ を計算し

$\dfrac{\left\| r^{(\ell)} \right\|}{\left\| Ax^{(\ell)} \right\|} < \varepsilon_2$ （本数値実験では $\varepsilon_2 = 10^{-8}$ ）

であれば収束．次の固有値を求める場合，(1)に戻るが，求めない場合，(4)へ．収束していない場合，(2)の①に戻るが，部分空間シフト・ランチョス法による反復計算がある回数（本数値実験の(2)では，$\ell_{\max} = 11$）を超えた場合，(3)に進む．この時，初期逐次シフト値を 1 番目の固有値 $\lambda_0^{(\ell-1)}$ にする．また，y_1 を x_1 とする．

(3)逐次シフト逆ベキ乗法による反復計算を行う．

① ℓ 反復時での $x^{(\ell)}$ は $x^{(\ell)} = [A-\lambda_0^{(\ell-1)} B]^{-1} B x^{(\ell-1)}$ によって求める．グラム・シュミットの方法により，既に得られた固有値ベクトルの抜き取りと正規化および近似固有値を次式で求める．λ_0 は初期原点移動量のままである．

$$\tilde{x}^{(\ell)} = x^{(\ell)} - \sum_{j=1}^{i} \left(x^{(\ell)T} B\phi_j \right) \phi_j ,$$

$$x^{(\ell)} = \tilde{x}^{(\ell)} \Big/ (\tilde{x}^{(\ell)T} B\tilde{x}^{(\ell)})^{\frac{1}{2}} , \quad \lambda^{(\ell)} = x^{(\ell)T} Ax^{(\ell)}$$

②収束判定を行う．最大反復回数（本数値実験の(3)では $\ell_{\max} = 1000$）を超えたら計算をストップ．ε_1 と ε_2 を収束判定値とすると

$\left|\dfrac{\lambda^{(\ell)} - \lambda^{(\ell-1)}}{\lambda^{(\ell)}}\right| < \varepsilon_1$ （本数値実験では $\varepsilon_1 = 10^{-14}$ ）

あるいは，残差ベクトル：$r^{(\ell)} = Ax^{(\ell)} - \lambda^{(\ell)} Bx^{(\ell)}$ を計算し

$\dfrac{\left\| r^{(\ell)} \right\|}{\left\| Ax^{(\ell)} \right\|} < \varepsilon_2$ （本数値実験では $\varepsilon_2 = 10^{-8}$ ）

であれば収束．収束していない場合，以下の式によって $\lambda_0^{(\ell)}$ を計算し，(3)の①に戻る．

$$\rho = \left| \lambda^{(\ell)} - \lambda^{(\ell-1)} \right| , \quad g = \left\{ r^{(\ell)} \right\}^T B^{-1} r^{(\ell)} ,$$

$$\beta^{(\ell)} = \rho g / \left(\rho^2 - g \right) , \quad \lambda_0^{(\ell+1)} = \lambda^{(\ell)} - \beta^{(\ell)}$$

(4) 最後に，求められた全ての固有値と固有ベクトルに対して，固有値と固定原点移動量 λ_0 との差の絶対値が小さい方から順に並び替えを行う．

3．数値実験

ランチョス逆ベキ乗法における有効性を示すために，標準固有値問題および一般固有値問題に関する例題による数値実験を行った．ここでの数値実験は，すべて倍精度演

算とした．求める固有解の個数は10個とした．先述のアルゴリズムに従った．計算には，今回はスーパーコンピューターを対象としていないこと，および最近のパーソナルコンピューターの性能向上などを考慮し，’Intel(R) Core™ i7 3.2GHz，RAM12.0 GB，Windows 7，PGI Fortran Workstation (pgiwsx64-106)’を使用した．また，解析時に必要となる連立方程式の解法として反復法（SCG法）を利用した．ICCG法やSCG法などの前処理を施した共役勾配法系の反復法は，大次元スパース行列に有効であるが，ICCG法は中間固有解に対し不安定な性状を示し，SCG法より計算時間が多かったのでここでは省いた．以下に詳細を記す．

3.1　標準固有値問題（ヘルムホルツ問題）

ここでは，２次元波動方程式の定常問題におけるヘルムホルツ方程式を離散化して生じる係数マトリックスを扱った．この固有値問題では固有値の解析解が分かっており，数値実験時に求められた固有値の精度について検証できる対象となっている．また，多くの多重根や極近接根をもつ求めにくい対象でもある．自由度と原点移動量を変化させながら数値実験した．

以下のようなヘルムホルツ２次元モデルを考える（図-1）．境界条件は境界値を０とする．ヘルムホルツ方程式に中心差分を用いて離散化を行うと，$Ax = \lambda x$ の固有値問題が得られる．ここで，$A = (a_{k,l})$ とおけば，係数行列 A の各要素は次式となる．

$$a_{l,l} = \frac{2}{\Delta x^2} + \frac{2}{\Delta y^2} \quad , \quad l = (i-1)n_y + j \quad , \quad (1 \le i \le n_x, 1 \le j \le n_y) \quad ,$$

$$a_{l,l+ny} = a_{l+ny,l} = -\frac{1}{\Delta x^2} \quad , \quad l = (i-1)n_y + j \quad , \quad (1 \le j \le n_x, 1 \le j < n_y) \quad ,$$

$$a_{l,l+1} = a_{l+1,l}$$

$$= -\frac{1}{\Delta y^2} \quad , \quad l = (i-1)n_y + j \quad , \quad (1 \le i < n_x, 1 \le j \le n_y) \quad ,$$

$a_{l,m} = 0$　上記以外の l, m

ここで，$\Delta x = l_x / (n_x + 1)$，$\Delta y = l_y / (n_y + 1)$ はそれぞれ x, y 方向の分割幅である．この係数行列 A の固有値の解析解は次式で与えられる．

$$\lambda_{i,j} = \frac{2}{\Delta x^2}\left[1 - \cos\frac{i\pi}{n_x + 1}\right] + \frac{2}{\Delta y^2}\left[1 - \cos\frac{j\pi}{n_y + 1}\right]$$

数値実験に用いたパラメータ $l_x, l_y, n_x, n_y, n = n_x \times n_y$ を表-1に示す．また，表-2にそれぞれのタイプ毎の初期原点移動量を示す．

図-2～6は，表-1のモデルAの５タイプについて，シフト逆べキ乗法（IP）とダブルシフト逆べキ乗法（DS）およびランチョス逆べキ乗法（LN）の計算時間を描いている．３解法共，不正解数は０であり安定した解法となっている．また，上図は３解法の計算時間を比較しているが，下図は

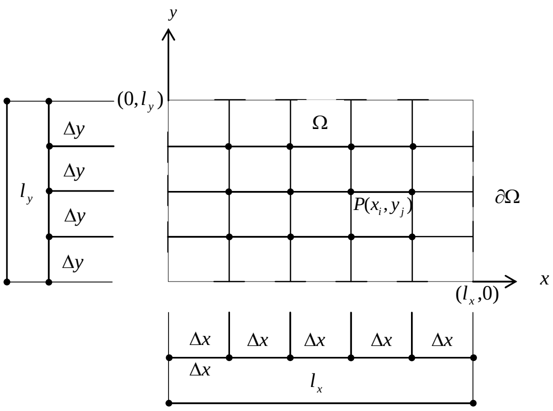

図-1　２次元モデルの一例

表-1　２次モデルのパラメーター

model	type	l_x	l_y	n_x	n_y	n
A	A-1	1	1	50	50	2500
	A-2	1	1	100	100	10000
	A-3	1	1	150	150	22500
	A-4	1	1	200	200	40000
	A-5	1	1	250	250	62500

表-2　初期原点移動量

model	type	λ_0					
A	A-1	0	5000	10000	15000	20000	25000
	A-2	0	20000	40000	60000	80000	100000
	A-3	0	40000	80000	120000	160000	200000
	A-4	0	70000	140000	210000	280000	350000
	A-5	0	110000	220000	330000	440000	550000

DSとLNの計算時間を描いている．IPで計算する場合，ある中間固有値近辺10個に対する計算時間のそれぞれのタイプの最大倍率は85～1092倍であり，中間固有値を求める時の計算時間は甚大である．中間固有値を求める場合がいかに高負荷であるかが分かる．ランチョス逆べキ乗法では，最大固有対付近以外は，部分空間シフト・ランチョスのアルゴリズムだけで解が求められる場合が多く，最大固有対付近ではシフト逆べキ乗法で収束していた．図からも分かるように，ランチョス逆べキ乗法とダブルシフト逆べキ乗法の計算時間はシフト逆べキ乗法に比べ格段に計算効率は高い．また，ランチョス逆べキ乗法の計算時間はダブルシフト逆べキ乗法と比べ殆ど変わらないが，最小固有

値近辺以外はほぼダブルシフト逆ベキ乗法より短く，計算効率は若干良い．

3.2　一般固有値問題（有限要素法平面骨組問題）

ここでは，図-7のような平面骨組問題で生じる係数行列を扱った．骨組の柱と梁は鉄筋コンクリート製で，両方共ヤング率は20.58GN/m^2 とした．柱と梁の断面（幅×高さ）はそれぞれ0.8m×0.8mと0.4m×0.8mである．部材長（階高とスパン長）はそれぞれ3ｍと6ｍにした．骨組の各節点は自由度3（ｘ方向変位ｕ，ｙ方向変位ｖ，たわみ角θ）を有しており，作成された係数（剛性）行列はdimensionの異なる，それぞれの要素の大きさに差がある対象となっている．また，本例題は，最大固有値に近づくにつれ近接固有値や極近接固有値が多数存在する対象である．自由度（表-3）と原点移動量（表-4）を変化させ数値実験した．SCG法の最大反復回数は自由度の3倍とした．また，SCG法において利用した対角要素は，λB を減じない元の対角要素を利用した．

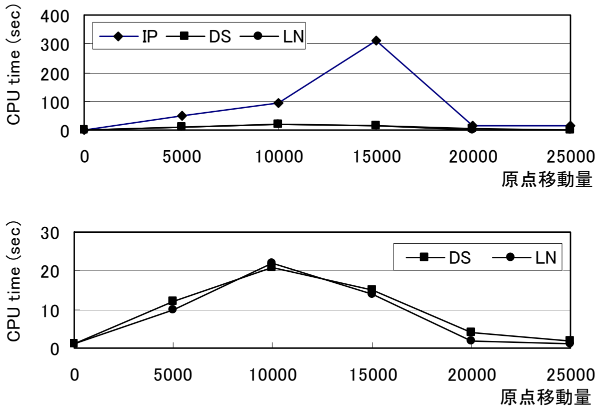

図-2　計算時間（2次元モデル，タイプA-1

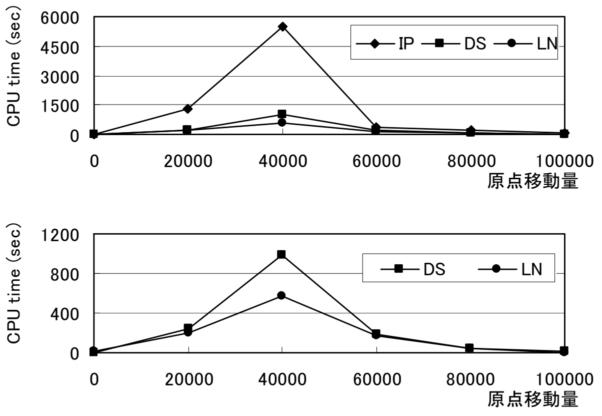

図-3　計算時間（2次元モデル，タイプA-2)

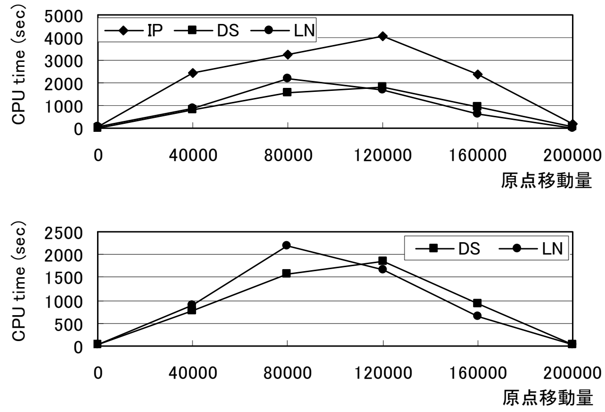

図-4　計算時間（2次元モデル，タイプA-3

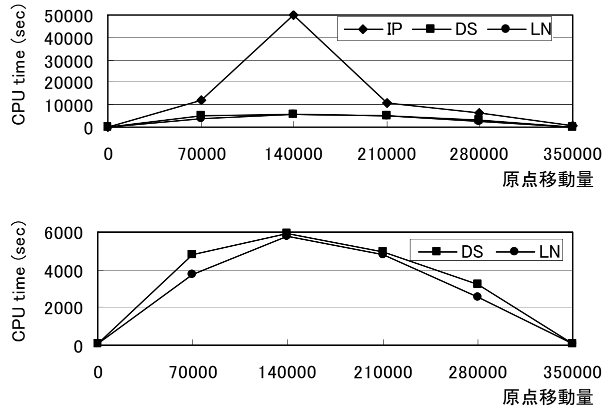

図-5　計算時間（2次元モデル，タイプA-4)

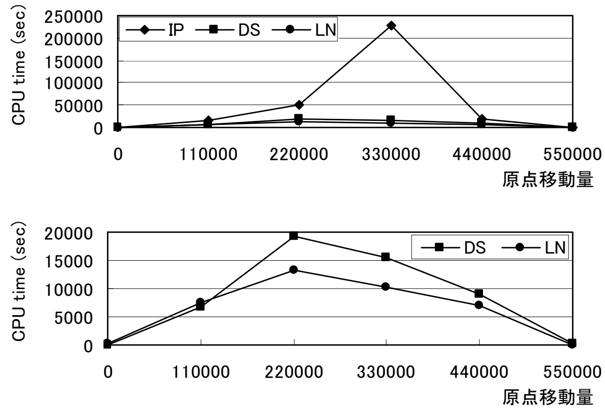

図-6　計算時間（2次元モデル，タイプA-5)

ここでの数値実験における行列B（質量行列）は，consistent mass matrixである．ただし，$B^{-1}r$ の計算は，標準固有値問題では$B=I$のため，提案法での連立1次方程式で解く回数は倍にならないが，一般固有値問題では$By=r$を解くことになり，提案法での連立1次方程式で解く回数は倍になる．しかし，$B^{-1}r$ の計算は原点移動量を求めるためだけで本質的な問題でないこと，および，lumped mass matrixでも近似的に十分なものであることを考慮し，平面骨組におけるlumped mass matrixを使用

した．よって，$B^{-1}r$ 計算用の B matrix は対角行列となり，提案法での連立１次方程式で解く回数は倍にならない．以下に，平面骨組用 element lumped mass matrix を示す．

$$\overline{B}=\frac{\rho\overline{A}\ell}{2}\begin{bmatrix}1&&&&&\\&1&&&0&\\&&\frac{\ell^2}{210}&&&\\&&&1&&\\&0&&&1&\\&&&&&\frac{\ell^2}{210}\end{bmatrix}$$

$\overline{B}$： element lumped mass matrix,　ρ：density,

$\overline{A}$： cross-section area, ℓ： length of element

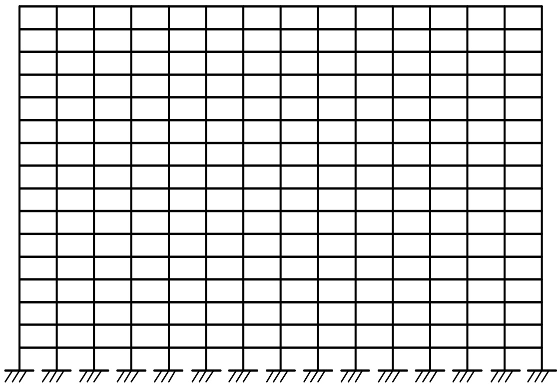

図-7 A plane frame model

表-3　Parameters of the frame model

model	type	*mr*	*nr*	*n*
A	A-1	16	14	720
	A-2	32	29	2880
	A-3	48	44	6480

mr： numbers of story,　*nr*： numbers of span,

n： degrees of freedom

表-4　平面骨組の初期原点移動量(λ_0)

model	type	λ_0			
A	A-1,2,3	0	2500	5000	7500

図-7～9 は，表-3 のモデルAの３タイプについて，シフト逆ベキ乗法（IP）とダブルシフト逆ベキ乗法（DS）およびランチョス逆ベキ乗法（LN）の計算時間を描いている．また，図毎の上図は３解法の計算時間を比較しているが，下図は DS と LN の計算時間を描いている．３解法共，不正解数は０であり安定した解法となっている．しかし，IP で計算する場合，ある中間固有値近辺 10 個に対する計算時間のそれぞれのタイプの最大倍率は 72～377 倍であり，

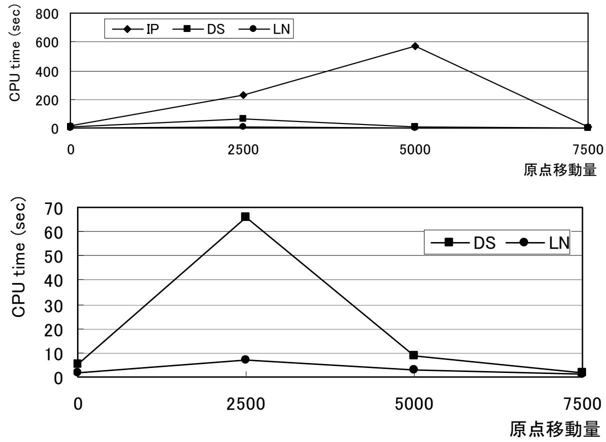

図-7 計算時間（平面骨組モデル，タイプ A-1）

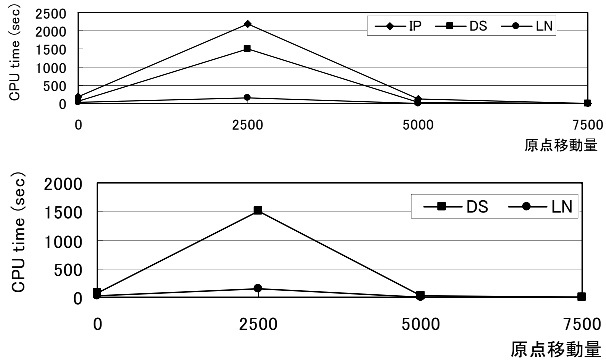

図-8 計算時間（平面骨組モデル，タイプ A-2）

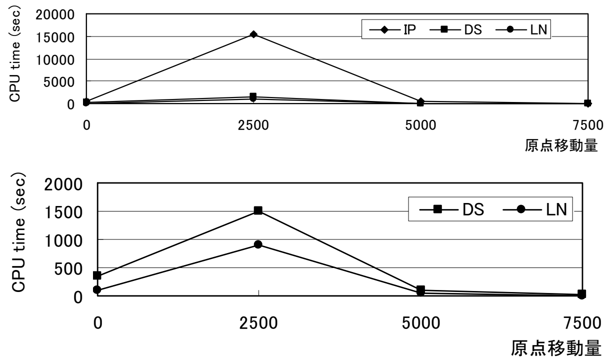

図-9 計算時間（平面骨組モデル，タイプ A-3）

中間固有値を求める時の計算時間は標準固有値問題の数値実験結果と同様に甚大である．中間固有値を求める場合がいかに高負荷であるかが分かる．図からも分かるように，ランチョス逆ベキ乗法とダブルシフト逆ベキ乗法の計算時間はシフト逆ベキ乗法に比べ格段に計算効率は高い．また，ランチョス逆ベキ乗法の計算時間はダブルシフト逆ベキ乗法より短く（type A で 1/2～1/9.4，type B で 1/1.3～1/9.9，type C で 1/1.7～1/3.3），ランチョス逆ベキ乗法はダブルシフト逆ベキ乗法より計算効率は高い．

５．結び

構造物の大規模化や細分化は構造解析時の行列次数を大次元化しており，構造解析における連立１次方程式の解法は，バンド型やスカイライン型による直接法から SCG 法や ICCG 法等の反復法に依存する方向にある．特に有限要素法ではその傾向が強い．動的解析や大変形解析に見られる固有値問題も同様である．中間固有値を求める場合は計算負荷が非常に大きい問題（最小固有値近辺を求める場合の何十倍から何百倍）となる．古典的原点移動逆べキ乗法は，ここでの数値実験では不正解数は０で安定した解法となっているが，提案法より計算負荷が大きい．ランチョス逆べキ乗法とダブルシフト逆べキ乗法は，最小固有値から中間固有値を挟んで最大固有値まで，安定して解を求めることができ，記憶容量を少なくして大次元まで考慮でき，そして計算時間を短くできる解法であると思われる．
本数値実験からダブルシフト逆べキ乗法とランチョス逆べキ乗法は，計算負荷を小さくし，安定的に解を求め得る解法と言えよう．また，ランチョス逆べキ乗法は，係数行列の要素の単位が異なり，要素の絶対値の差が大きい場合でも有効であることを示した。

参考文献

1) Ajiz,M.A. and Jenning,A., A Robust Incomplete Choleski-Conjugate Gradient Algorithm, Int. J. Numer. Meth. Engng, 20(1984), 949-966.

2) Arbenz,P., Hetmaniuk,U.L., Lehoucq,R.B. and Tuminaro,R.S., A Comparison of Eigensolvers for Large-scale 3D Modal Analysis using AMG-Preconditioned Iterative Methods, Int. J. Numer. Meth. Engng, 1(2003), 1-21.

3) Bathe,K.J., Finite Element Procedures in Engineering Analysis, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, 1982.

4) Briggs,W.L., Henson,V.E. and McCormick,S.F., A Multigrid Tutorial Second Edition, SIAM, Philadelphia, 2001, 137-161.

5) Golub,G.H. and Underwood,R.: The Block Lanczos Method for Computing Eigenvalues, in Mathematical Software Ⅲ, J.Rice,ed., Academic Press, New York, 1977.

6) Golub,G.H. and van Loan,C.F., Matrix Computation, Johns Hopkins, Baltimore, 1983.

7) Hestenes,M.R. and Stiefel,E., Methods of Conjugate Gradients for Solving Linear Systems, Journal of Research of the National Bureau of Standards, 49(1952), 409-436.

8) 柏木光博，一般化共役勾配法(GCG 法)の有限要素法への適用に関する研究 その４．特異性判定修正式と平面・立体骨組の悪条件化数値実験，日本建築学会構造系論文集，521(1999)，185-192.

9) 柏木光博，共役勾配法による最大あるいは最小固有解の一算定法，日本計算工学会論文集，1(1999)，1-5.

10) 柏木光博，共役勾配法による大次元スパース対称行列の固有解，日本応用数理学会論文誌，15(2005)，29-43.

11) Kashiwagi,M., A Method for Determining Eigensolutions of Large, Sparse, Symmetric Matrices by the Preconditioned Conjugate Gradient Method in the Generalized Eigenvalue Problem，日本建築学会構造系論文集，629(2008)，1209-1217.

12) 柏木光博，ダブルシフト逆べキ乗法によるスパース対称行列の中間固有解の一算定法，日本応用数理学会論文誌，19(2009)，23-38.

13) 柏木光博，一般固有値問題におけるダブルシフト逆べキ乗法によるスパース対称行列の中間固有解の一算定法，日本建築学会構造工学論文集，56B(2010)，445-451.

14) 片山拓朗，清田秀二，柏木光博，大脇信一，平井一男，残差ベクトルを用いた標準固有値問題の部分空間解法，日本応用数理学会論文誌，4(1994)，299-325

15) Meijerink,J.A. and van der Vorst,H.A., Guidelines for the Usage of Incomplete Decompositions in Solving Set of Linear Equations as They Occur in Practical Problems, Journal of Computational Physics, 44(1981), 134-155.

16) 村田健郎，小国力，三好俊郎，小柳義夫編著，工学における数値シミュレーション・スーパーコンピュータの応用，丸善，東京，1988.

17) Nour-omid,B., Parlett,B.N. and Taylor, R.L.: Lanczos versus Subspace Iteration for Solution of Eigenvalue Problems, Int. J. Numer. Meth. Engng, 19(1983), 859-971.

18) Paige,C.C., Computational Variants of the Lanczos Method for the Eigenproblem, J.Inst.Maths Applics, 10(1972), 373-381.

19) Sleipen,G.L.G. and van der Vorst,H.A., A Jacobi-Davidson Iteration Method for Linear Eigenvalue Problems, SIAM, 17(1996), 401-425.

20) van der Vorst,H.A.，超大型固有値問題の解法，応用数理，8(1998)，6-20.

21) 矢川元基，青山裕司，有限要素固有値解析 大規模並列計算手法，森北出版，東京，2001.