FrontISTRにおける固有値解析の解説

東京大学大学院 奥田研究室
森田直樹

目次

- 目次
- 目的
- 固有値問題の分類
- 固有値問題の数理的基礎
- FrontISTR ver. 4.5 RC1における固有値解析
- FrontISTR 固有値解析プログラムの改良

目的

- 固有値問題の概略について解説を行います
- 固有値問題の数理的な基礎について解説を行います
- FrontISTRに実装されている固有値解析プログラムについて解説を行います

固有値問題の分類（概要）

- 行列の対称性
- 固有値問題の形
- 行列の粗密
- 求めたい固有値・固有ベクトルの数

固有値問題の分類 [1/2]

- 行列の対称性
  - 実対称行列　$A = A^t$
    ・実対称行列は実固有値を持つ[付録A]
    ・全ての固有値が正の場合，正定値対称
  - 複素エルミート行列　$H = \overline{H}^t = H^*$
  - 非対称行列

- 固有値問題の分類
  - 標準固有値問題　$Ax = \lambda x$
  - 一般固有値問題　$Ax = \lambda Bx$
  - 多項式固有値問題　$\lambda^n Ax + \lambda^{n-1} Bx + \cdots + Zx = \mathbf{0}$
  - 非線形固有値問題

付録A：実対称行列の固有値は必ず実数

実対称行列 $\boldsymbol{A}$ と複素ベクトル $\boldsymbol{z}$ に対応する

固有値 λ に対して，$\boldsymbol{A}\boldsymbol{z} = \lambda\boldsymbol{z}$ が成り立つとき，

$$\lambda\overline{\boldsymbol{z}}^t\boldsymbol{z} = \overline{\boldsymbol{z}}^t(\lambda\boldsymbol{z}) = \overline{\boldsymbol{z}}^t\boldsymbol{A}\boldsymbol{z} = \overline{\boldsymbol{z}}^t\overline{\boldsymbol{A}}^t\boldsymbol{z}$$

$$= (\overline{\boldsymbol{A}}\overline{\boldsymbol{z}})^t\boldsymbol{z} = \overline{(\boldsymbol{A}\boldsymbol{z})}^t\boldsymbol{z} = \overline{(\lambda\boldsymbol{z})}^t\boldsymbol{z} = \overline{\lambda}\overline{\boldsymbol{z}}^t\boldsymbol{z}$$

の関係から，$(\lambda - \overline{\lambda})\overline{\boldsymbol{z}}^t\boldsymbol{z} = 0$ を得る．

$\boldsymbol{z} \neq 0$ のとき $\overline{\boldsymbol{z}}^t\boldsymbol{z} \neq 0$ より，$\lambda = \overline{\lambda}$ が示された．

固有値問題の分類 [2/2]

- 行列の粗密
  - 密行列
  - 疎行列
  - 特殊な行列
    - 三重対角行列

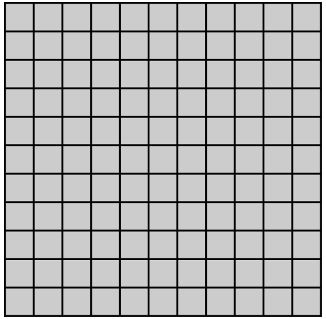


図1-a 密行列

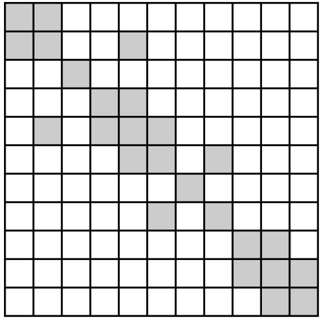


図1-b 疎行列

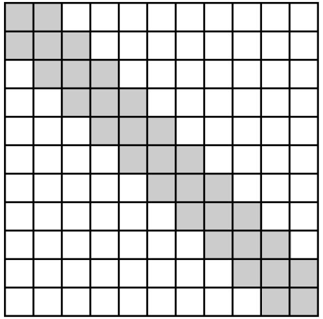


図1-c 三重対角行列

- 求めたい固有値・固有ベクトルの数
  - 固有値・固有ベクトルの全て
  - 固有値・固有ベクトルの一部

構造解析で解く固有値問題

- 行列の対称性
  - **実対称行列** $A = A^t,\ B = B^t$
- 固有値問題の分類
  - **一般固有値問題** $Ax = \lambda Bx$
- 行列の粗密
  - **疎行列**
- 求めたい固有値・固有ベクトルの数
  - **固有値・固有ベクトルの一部**
  - **工学的に低次側の固有値が重要**

有限要素法で解く固有値問題の数理的基礎

相似変換が可能

三重対角行列に変換可能

標準固有値問題における
Lanczos法

一般固有値問題における
Lanczos法

↓

三重対角行列の固有値導出

notation

行列 $\boldsymbol{X}$ の第 i 番目の列ベクトル $\boldsymbol{x}_i$

行列 $\boldsymbol{X}$ の第 (i,j) 番目の要素 x_{ij}

正定値対称行列 $\boldsymbol{A}$, $\boldsymbol{B}$, $\boldsymbol{C}$, $\boldsymbol{X}$, $\boldsymbol{Y}$

全体剛性行列 $\boldsymbol{K}$

全体質量行列 $\boldsymbol{M}$

三重対角行列 $\boldsymbol{T}$

下三角行列 $\boldsymbol{L}$

ギブンス行列 $\boldsymbol{G}$

正則行列 $\boldsymbol{Q}$

一時ベクトル $\boldsymbol{p}$, $\boldsymbol{r}$, $\boldsymbol{s}$

ランチョス三重対角行列の係数 α, β

第 i 番目の固有値 λ_i

転置行列 $\boldsymbol{X}^t$

逆行列 $\boldsymbol{X}^{-1}$

固有値問題の相似変換

- 正則行列Qを用いて，$C = Q^{-1}AQ$と相似変換する
- Aの固有値とCの固有値は等しく[付録B]
  固有値λ_iに対するAの固有ベクトルx_iと，Cの固有ベクトルy_iには
  $Q^{-1}x_i = y_i$の関係がある
- 固有値・固有ベクトルを求めやすい特殊な行列（**三重対角行列**）に変換する手法がとられる

付録B：相似変換で固有値は不変

正則行列 $\boldsymbol{Q}$ に対して，$\boldsymbol{B}=\boldsymbol{Q}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{Q}$ が成り立つので

特性方程式 $\det(\lambda\boldsymbol{I}-\boldsymbol{B})$ から，

$$\det(\lambda\boldsymbol{I}-\boldsymbol{B})=\det(\lambda\boldsymbol{I}-\boldsymbol{Q}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{Q})=\det(\lambda\boldsymbol{Q}^{-1}\boldsymbol{I}\boldsymbol{Q}-\boldsymbol{Q}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{Q})$$

$$=\det(\boldsymbol{Q}^{-1}(\lambda\boldsymbol{I}-\boldsymbol{A})\boldsymbol{Q})=\det(\boldsymbol{Q}^{-1})\det(\lambda\boldsymbol{I}-\boldsymbol{A})\det(\boldsymbol{Q})=\det(\lambda\boldsymbol{I}-\boldsymbol{A})$$

の関係を得る．

固有値計算の概略

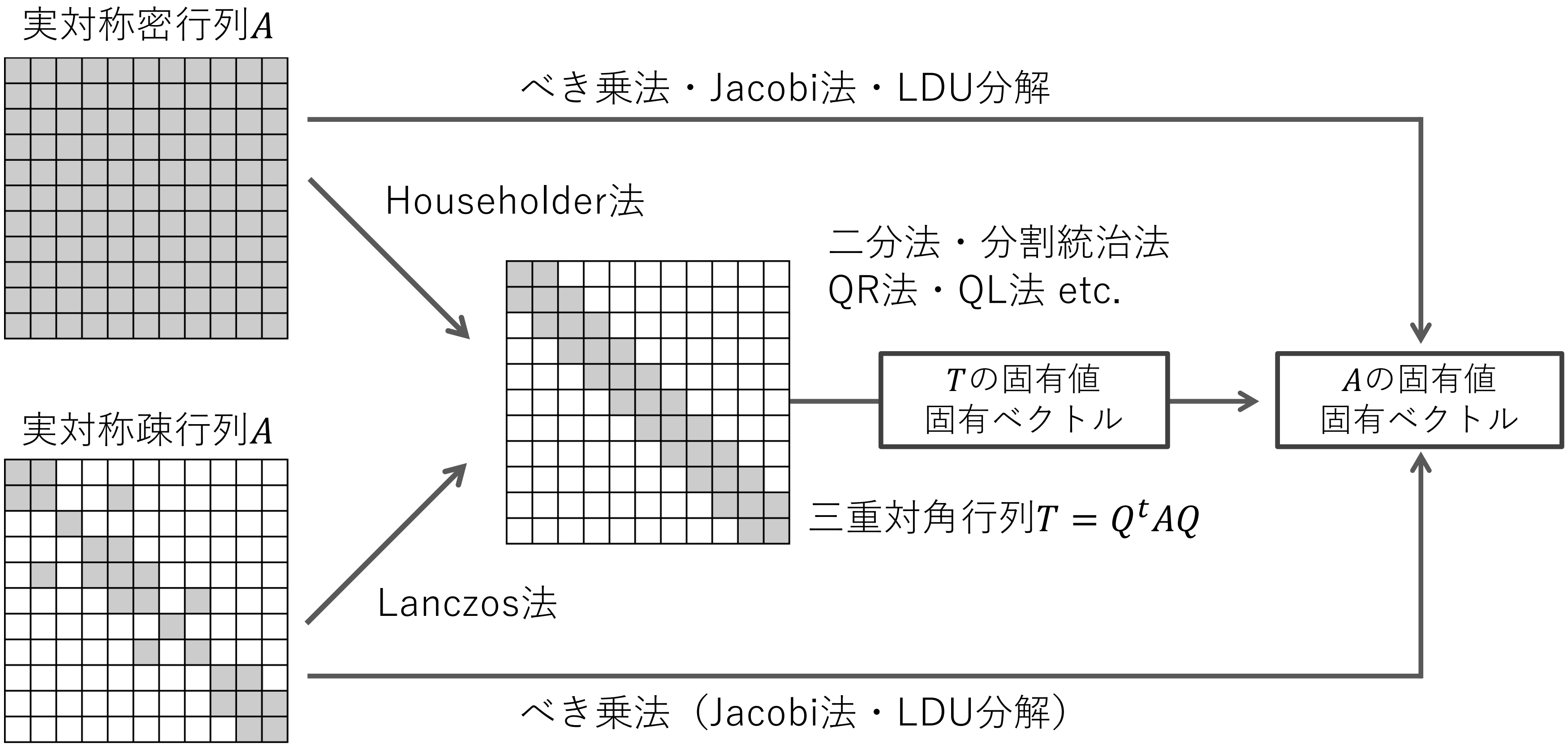


図2 固有値計算の概略

固有値計算の概略

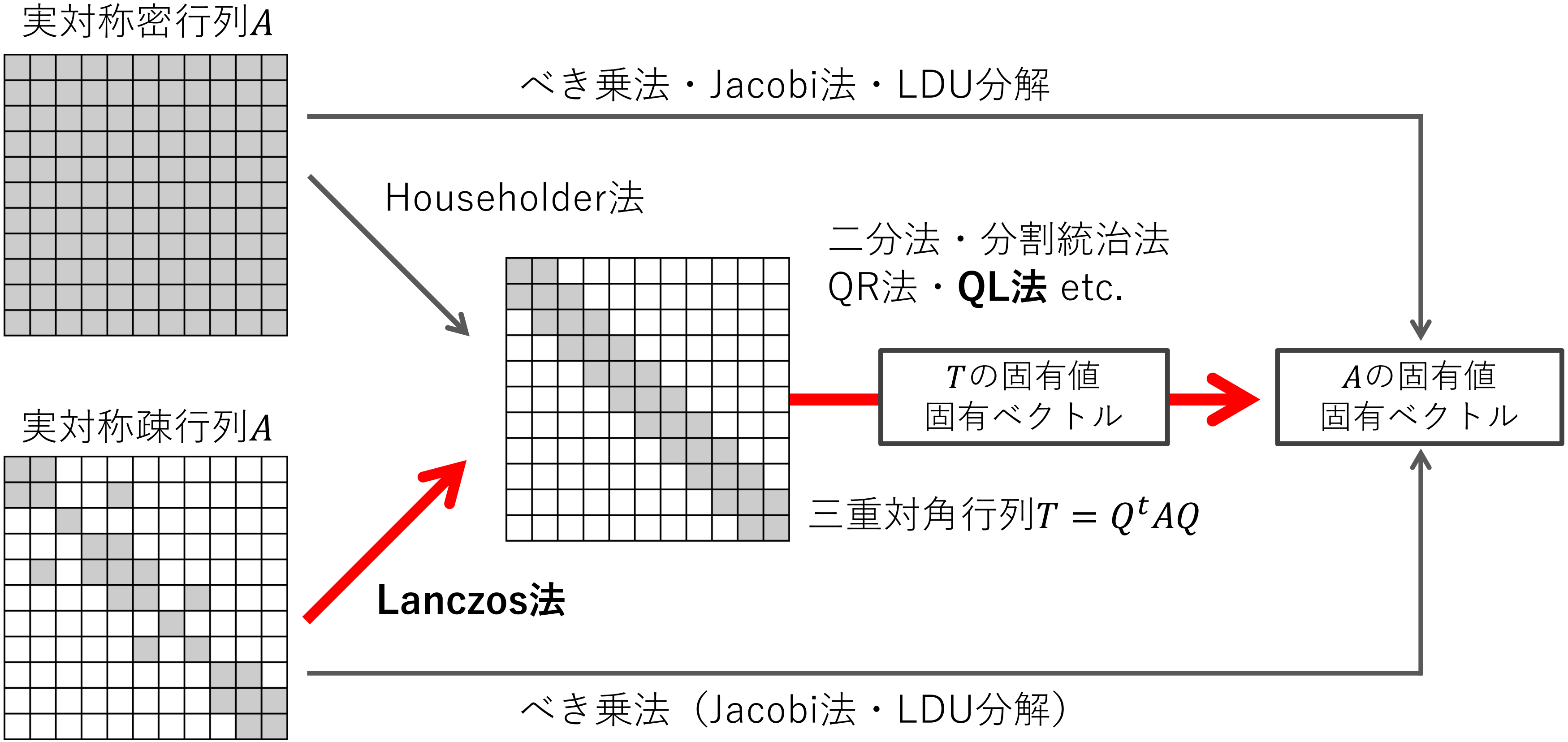


図3 固有値計算の概略

有限要素法で解く固有値問題の数理的基礎

[済] 相似変換が可能

三重対角行列に変換可能

標準固有値問題における
Lanczos法

一般固有値問題における
Lanczos法

↓

三重対角行列の固有値導出

Arnoldi法による相似変換 [1/2]

$$
\begin{aligned}
&\boldsymbol{q}_1 = \boldsymbol{q}_1/||\boldsymbol{q}_1||_2\\
&\textbf{for } i = 1, 2, 3, \ldots, n \textbf{ do}\\
&\quad \boldsymbol{p} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{q}_i\\
&\quad \textbf{for } j = 1, 2, 3, \ldots, i \textbf{ do}\\
&\qquad h_{ji} = {}^t\boldsymbol{q}_j\boldsymbol{p}\\
&\qquad \boldsymbol{p} = \boldsymbol{p} - h_{ji}\boldsymbol{q}_j\\
&\quad \textbf{end for}\\
&\quad h_{i+1,i} = ||\boldsymbol{p}||_2\\
&\quad \boldsymbol{q}_{i+1} = \boldsymbol{p}/h_{i+1,i}\\
&\textbf{end for}
\end{aligned}
$$

図4 Arnoldi法

- Krylov部分空間における正規直交基底を求める手法
  - 行列Aに共役なベクトルを求める
  - 共役グラムシュミット法の一種
- 相似変換$Q^{-1}AQ = H$を得る
- 計算によって得られる行列Hは，ヘッセンベルグ行列となる
  - h_{ij}は行列Hの(i,j)番目の要素

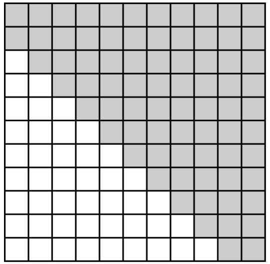


図5 ヘッセンベルグ行列

Arnoldi法による相似変換 [2/2]

$\boldsymbol{q}_1 = \boldsymbol{q}_1 / ||\boldsymbol{q}_1||_2$
for $i = 1, 2, 3, \ldots, n$ **do**
  $\boldsymbol{p} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{q}_i$
  for $j = 1, 2, 3, \ldots, i$ **do**
    $h_{ji} = {}^t\boldsymbol{q}_j\boldsymbol{p}$
    $\boldsymbol{p} = \boldsymbol{p} - h_{ji}\boldsymbol{q}_j$
  end for
  $h_{i+1,i} = ||\boldsymbol{p}||_2$
  $\boldsymbol{q}_{i+1} = \boldsymbol{p} / h_{i+1,i}$
end for

図4 Arnoldi法

- 行列Aが正定値対称な場合，行列Hは対称となる
- ヘッセンベルグ行列が対称→三重対角行列となる
- Arnoldi法（またはHouseholder法）に基づいて三重対角行列が得られる

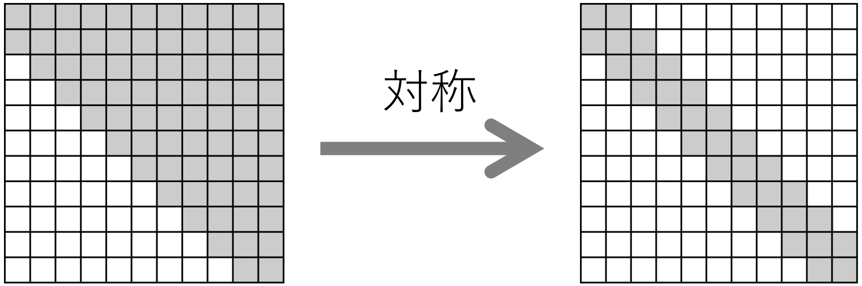


図6 ヘッセンベルグ行列と三重対角行列

有限要素法で解く固有値問題の数理的基礎

[済] 相似変換が可能

[済] 三重対角行列に変換可能

標準固有値問題における
Lanczos法

一般固有値問題における
Lanczos法

三重対角行列の固有値導出

標準固有値問題におけるLanczos法 [1/2]

- Arnoldi法により，実対称行列は$\mathrm{Q}^{-1}AQ = T$として相似変換可能
  - Tは三重対角行列
- $AQ = QT$の関係から，Lanczos法が得られる．

標準固有値問題におけるLanczos法 [2/2]

$\boldsymbol{AQ} = \boldsymbol{QT}$ に対して，

$$\boldsymbol{Q} = [\boldsymbol{q}_1 \boldsymbol{q}_2 \boldsymbol{q}_3 \ldots \boldsymbol{q}_n],\ \boldsymbol{T} = \begin{bmatrix} \alpha_1 & \beta_2 & & & \\ \beta_2 & \alpha_2 & \beta_3 & & \\ & \beta_3 & \alpha_3 & \beta_4 & \\ & & \beta_4 & \ddots & \beta_n \\ & & & \beta_n & \alpha_n \end{bmatrix}$$ とすると，

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{q}_i = \beta_i \boldsymbol{q}_{i-1} + \alpha_i \boldsymbol{q}_i + \beta_{i+1} \boldsymbol{q}_{i+1}$$

左から $\boldsymbol{q}_i$ を乗じて，$\boldsymbol{q}_i \boldsymbol{A} \boldsymbol{q}_i = \alpha_i$ が得られる（ただし ${}^t\boldsymbol{q}_i \boldsymbol{q}_j = 0 \quad (i \neq j)$）.

また，$\beta_{i+1} \boldsymbol{q}_{i+1} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{q}_i - \alpha_i \boldsymbol{q}_i - \beta_i \boldsymbol{q}_{i-1}$ の関係から，α_i, β_i が再帰的に求められる.

Lanczos法（標準固有値問題 $Ax = \lambda x$）

$\beta_1 = 0,\ \boldsymbol{q}_0 = \mathbf{0},\ \boldsymbol{q}_1 = \boldsymbol{q}_1/||\boldsymbol{q}_1||_2$

for $i = 1, 2, 3, \ldots, n$ **do**

$\quad \boldsymbol{p} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{q}_i - \beta_i \boldsymbol{q}_{(i-1)}$

$\quad \alpha_i = \boldsymbol{p}^t \boldsymbol{q}_i$

$\quad \boldsymbol{p} = \boldsymbol{p} - \alpha_i \boldsymbol{q}_i$

直交化の部分

$\quad \beta_{i+1} = ||\boldsymbol{p}||_2$

$\quad \boldsymbol{q}_{i+1} = \boldsymbol{p}/\beta_{i+1}$

正規化の部分

end for

図7 Lanczos法

構造解析で解く一般固有値問題 [1/2]

- 一般固有値問題 $Ax = \lambda Bx$ に対し
  構造解析では $Kx = \lambda Mx$ を解く
  - Kは全体剛性行列，Mは全体質量行列

- 解法の種類
  - 陽的に問題を変換するため，$B = LL^t$とコレスキー分解できることを利用し
    標準固有値問題 $L^{-1}AL^{-t}y = \lambda y$，$y = L^t x$を解く
    - 外部固有値ソルバを用いた求解に対応できる
    - $L^{-1}AL^{-t}$の計算負荷が大きい
  - 陰的に計算しながら，一般固有値問題 $Ax = \lambda Bx$を直接解く
    - **FrontISTRではこの方法を採用している**

構造解析で解く一般固有値問題 [2/2]

- 工学的には低次側の固有値が重要

- Lanczos法をべき乗法の拡張と考えると，
  行列Aに対し絶対値最大の固有値が求まる

- 絶対値最小の固有値から求めるために，
  行列A^{-1}に対しLanczos反復を行う
  - Lanczos逆べき乗法（Lanczos inverse power iteration）
  - $p = Aq$と計算していた部分を，　$p = A^{-1}q$と置き換える．
    すなわち $Ap = q$を解くために線形ソルバの呼び出しが必要になる

有限要素法で解く固有値問題の数理的基礎

[済] 相似変換が可能

[済] 三重対角行列に変換可能

[済] 標準固有値問題における
Lanczos法

一般固有値問題における
Lanczos法

↓

三重対角行列の固有値導出

一般固有値問題におけるLanczos法

- 一般固有値問題における固有ベクトルは,
  行列Bに対して共役なベクトルとなる[付録C]

- 一般固有値問題におけるLanczos法は，以下のように解かれる[1]
  - $Ax = \lambda Bx$に対して，$C = B^{-1}A$として
    $Cx = \lambda x$を解く
  - Lanczos反復中に計算される内積演算を,
    2ノルム$|x|_2 = (x, x)$から,
    Bノルム$|x|_B = (Bx, x)$に変更する

[1] Y. Saad, Numerical Methods for Large Eigenvalue Problem, SIAM, 2011.

付録C：一般固有値問題の固有ベクトルはB直交

標準固有値問題の異なる固有方程式 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_i = \lambda_i \boldsymbol{x}_i$，$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_j = \lambda_j \boldsymbol{x}_j$ に対し，それぞれ ${}^t\boldsymbol{x}_j$，${}^t\boldsymbol{x}_i$ を左から乗じて，${}^t\boldsymbol{x}_j \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_i = \lambda_i {}^t\boldsymbol{x}_j \boldsymbol{x}_i$，${}^t\boldsymbol{x}_i \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_j = \lambda_j {}^t\boldsymbol{x}_i \boldsymbol{x}_j$ を得る．

ふたつの式の差を取ると，$(\lambda_i - \lambda_j){}^t\boldsymbol{x}_i \boldsymbol{x}_j = 0$ であり，$\lambda_i \neq \lambda_j$ より，${}^t\boldsymbol{x}_i \boldsymbol{x}_j = 0$ である．

以上より，標準固有値問題の固有ベクトル $\boldsymbol{x}$ は，互いに直交する．

一般固有値問題の異なる固有方程式 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_i = \lambda_i \boldsymbol{B}\boldsymbol{x}_i$，$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_j = \lambda_j \boldsymbol{B}\boldsymbol{x}_j$ に対し，同様にそれぞれ ${}^t\boldsymbol{x}_j$，${}^t\boldsymbol{x}_i$ を左から乗じて，${}^t\boldsymbol{x}_j \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_i = \lambda_i {}^t\boldsymbol{x}_j \boldsymbol{B}\boldsymbol{x}_i$，${}^t\boldsymbol{x}_i \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_j = \lambda_j {}^t\boldsymbol{x}_i \boldsymbol{B}\boldsymbol{x}_j$ を得る．

ふたつの式の差を取ると，$(\lambda_i - \lambda_j){}^t\boldsymbol{x}_i \boldsymbol{B}\boldsymbol{x}_j = 0$ であり，$\lambda_i \neq \lambda_j$ より，${}^t\boldsymbol{x}_i \boldsymbol{B}\boldsymbol{x}_j = 0$ である．

以上より，一般固有値問題の固有ベクトル $\boldsymbol{x}$ は，行列 $\boldsymbol{B}$ に共役なベクトルである．

Lanczos法（一般固有値問題 $Ax = \lambda Bx$）[1/2]

$\beta_1 = 0,\ \boldsymbol{q}_0 = \boldsymbol{0},\ \boldsymbol{q}_1 = \boldsymbol{q}_1/||\boldsymbol{q}_1||_B$
for $i = 1, 2, 3, \ldots, n$ **do**
  $\boldsymbol{p} = \boldsymbol{B}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{q}_i - \beta_i \boldsymbol{q}_{(i-1)}$
  $\alpha_i = {}^t\boldsymbol{p}\boldsymbol{B}\boldsymbol{q}_i$
  $\boldsymbol{p} = \boldsymbol{p} - \alpha_i \boldsymbol{q}_i$
  $\beta_{i+1} = ||\boldsymbol{p}||_B$
  $\boldsymbol{q}_{i+1} = \boldsymbol{p}/\beta_{i+1}$
end for

図8 Lanczos法

- 最小固有値を求めるために，Lanczos逆べき乗法を適用
- Bノルムに関する計算順序を整理

Lanczos法（一般固有値問題 $Ax = \lambda Bx$）[2/2]

$\beta_1 = 0,\ \boldsymbol{q}_0 = \boldsymbol{0}$

$\boldsymbol{q}_1 = \boldsymbol{q}_1 / \|\boldsymbol{q}_1\|_B$

$\boldsymbol{p} = \boldsymbol{B}\boldsymbol{q}_1$

for $i = 1, 2, 3, \ldots\ n$ **do**

$\quad \boldsymbol{A}\boldsymbol{s} = \boldsymbol{p}$

$\quad \boldsymbol{s} = \boldsymbol{s} - \beta_i \boldsymbol{q}_{(i-1)}$

$\quad \alpha_i = {}^t\boldsymbol{p}\boldsymbol{s}$

$\quad \boldsymbol{s} = \boldsymbol{s} - \alpha_i \boldsymbol{q}_i$

$\quad \boldsymbol{r} = \boldsymbol{B}\boldsymbol{s}$

$\quad \beta_{i+1} = \sqrt{{}^t\boldsymbol{r}\boldsymbol{s}}$

$\quad \boldsymbol{p} = \boldsymbol{r} / \beta_{i+1}$

$\quad \boldsymbol{q}_{i+1} = \boldsymbol{s} / \beta_{i+1}$

end for

図9 Lanczos法

- FrontISTRで採用するLanczos法アルゴリズム
- 反復回数の最大値nは，n =行列A の自由度ー回転自由度とおく
- 次項のLanczos法の収束判定を用いて，計算ループを終了する

Lanczos法の収束判定

標準固有値問題 $\boldsymbol{Ax} = \lambda\boldsymbol{x}$ に対し，残差 $\boldsymbol{r} = \boldsymbol{Ax} - \lambda\boldsymbol{x}$ とおく．
Lanczos 法によって行列 $\boldsymbol{A}$ と三重対角行列 $\boldsymbol{T}$ の相似変換 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{QTQ}^{-1}$ を得ると
固有値 λ_i に対する行列 $\boldsymbol{A}$ の固有ベクトル $\boldsymbol{x}_i$ と，行列 $\boldsymbol{T}$ の固有ベクトル $\boldsymbol{y}_i$ には
$\boldsymbol{x}_i = \boldsymbol{Qy}_i$ の関係がある．このとき，残差 $\boldsymbol{r}$ は，以下の式で得られる．

$$\boldsymbol{r} = \boldsymbol{Ax} - \lambda\boldsymbol{x} = \boldsymbol{AQy} - \lambda\boldsymbol{Qy} = \boldsymbol{AQy} - \boldsymbol{QTy} = (\boldsymbol{AQ} - \boldsymbol{QT})\boldsymbol{y}$$

一方，Lanczos 法を反復回数 m で打切った場合の誤差は，
$\boldsymbol{AQ}_m = \boldsymbol{Q}_m\boldsymbol{T} + \beta_{m+1}\boldsymbol{q}_{m+1}\boldsymbol{e}_m^t$ と表せる．従って，Lanczos 反復の残差 $\boldsymbol{r}_m$ について

$$\boldsymbol{r}_m = (\boldsymbol{AQ}_m - \boldsymbol{Q}_m\boldsymbol{T})\boldsymbol{y} = \beta_{m+1}\boldsymbol{q}_{m+1}\boldsymbol{e}_m^t\boldsymbol{y}$$ が得られる．

以上により，Lanczos 反復を打ち切るには，閾値 ε に対し $|\beta_m| < \varepsilon$ を満たせばよい．

有限要素法で解く固有値問題の数理的基礎

[済] 相似変換が可能

[済] 三重対角行列に変換可能

[済] 標準固有値問題における Lanczos法

[済] 一般固有値問題における Lanczos法

三重対角行列の固有値導出

三重対角行列の固有値導出

- 一般固有値問題の固有対をもつ
  三重対角行列が算出された

- この三重対角行列の固有値・固有ベクトルを求めればよい
  - 二分法・分割統治法・QR法・QL法などがある

- FrontISTRでは，QL法に基づいた
  固有値・固有ベクトルの計算を行っている

QL法による固有値・固有ベクトルの算出 [1/2]

ギブンス行列 $\boldsymbol{G} = \begin{bmatrix} 1 & & & & & & \\ & \ddots & & & & & \\ & & \cos\theta & & \sin\theta & & \\ & & & \ddots & & & \\ & & -\sin\theta & & \cos\theta & & \\ & & & & & \ddots & \\ & & & & & & 1 \end{bmatrix}$ を

$$\boldsymbol{G}_{i,j,\theta} = \begin{cases} g_{kk} = 1 & (1 \le k \le n; k \ne i, j) \\ g_{kk} = \cos\theta & (k = i, j) \\ g_{ij} = \sin\theta & \\ g_{ji} = -\sin\theta & \\ g_{kl} = 0 & (1 \le k, l \le k; l \ne i, j) \end{cases}$$ と表す.

QL法による固有値・固有ベクトルの算出 [2/2]

行列 $\boldsymbol{A}$ に行列 $\boldsymbol{G}$ を次々と左から乗じ，下三角行列 $\boldsymbol{L}$ に変換できるとする．
これを，$\boldsymbol{Q}^{-1} = \boldsymbol{G}_{1,2,-\theta}\boldsymbol{G}_{2,3,-\theta}\ldots\boldsymbol{G}_{n-1,n,-\theta}$ として，$\boldsymbol{Q}^{-1}\boldsymbol{A} = \boldsymbol{L}$ と表す．
このとき，$\boldsymbol{A}' = \boldsymbol{L}\boldsymbol{Q}$ を考えると，$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{Q}\boldsymbol{L}$ より，$\boldsymbol{A}' = \boldsymbol{Q}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{Q}$ となり，
$\boldsymbol{A}'$ の固有値は $\boldsymbol{A}$ の固有値と等しく，$\boldsymbol{A}'$ は対角行列に漸近することが知られている．

- A'の対角成分から固有値を決定した後，固有ベクトルを得る
  - QL法では，固有値a'_{ii}と固有ベクトル$\boldsymbol{q}_i$が対応する
- LAPACKではQR分解$A = QR$の関数DSTEQRが提供されている

有効質量・刺激係数の算出

刺激係数 $P_i = \dfrac{\boldsymbol{x}_i^t \boldsymbol{M}}{\boldsymbol{x}_i^t \boldsymbol{M} \boldsymbol{x}_i}$

有効質量 $E_i = \dfrac{(\boldsymbol{x}_i^t \boldsymbol{M})^2}{\boldsymbol{x}_i^t \boldsymbol{M} \boldsymbol{x}_i}$

- 上記の関係から，有効質量，刺激係数を求める．
  - 算出の際に，回転自由度は考慮しない

FrontISTRにおける固有値解析

- FrontISTRのマニュアルの訂正
(FrontISTR_user_manual_Ver36.pdf p.18)

- **2.3.3 シフト付き逆反復法**
の記載があるが,
固有値シフト機能がFrontISTRでは実装されていない.
  - （実際にはシフト付逆反復法を実装しようとした痕跡がある）

FrontISTRにおける固有値解析

- 関連するプログラムソース
  - /fistr1/src/analysis/dynamic/mode/
    - fstr_solve_eigen.f90　：固有値解析のメイン関数
    - fstr_EIG_setMASS.f90　：質量行列の計算関数
    - fstr_EIG_lanczos.f90　：Lanczos法のサブルーチン
    - fstr_EIG_lczeigenm.f90　：Lanczos法用のモジュール定義
    - fstr_EIG_getamatf90　：行列ベクトル積の関数
    - fstr_EIG_matmult.f90　：行列ベクトル積の関数
    - fstr_EIG_tridiag.f90　：三重対角行列の固有値計算関数
    - fstr_EIG_mgs1.f90　：修正GS法の関数
    - fstr_EIG_output.f90　：結果出力関数

メイン関数：fstr_solve_eigen.f90 [1/4]

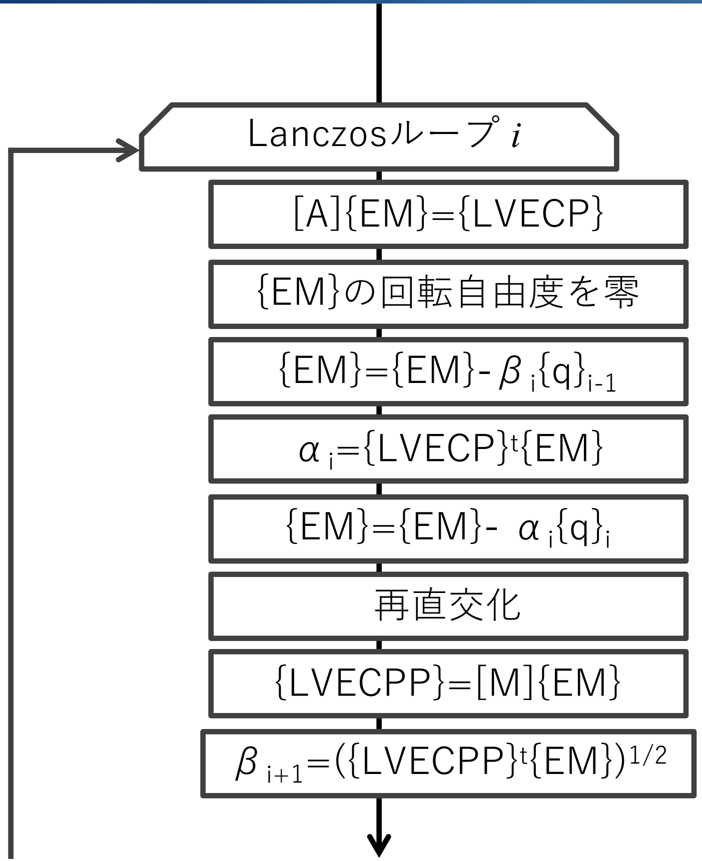
変数初期化	～L114
全体剛性行列計算	L116～L127
回転自由度判定フィルタ	L129～L147
回転慣性の除去	L149～L185
変数初期化	L187～L283
全体質量行列計算	L285～L289

サブ関数：fstr_EIG_lanczos.f90

1. 初期固有ベクトル設定
2. {EVEC}をランダム生成
3. {EVEC}の回転自由度を零
4. $\{EVEC\}=\{EVEC\}/|\{EVEC\}|_2$
5. q=0
6. $\beta_1=(\{EVEC\}^t[M]\{EVEC\})^{1/2}$
7. $\{q\}_1=\{EVEC\}/\beta_1$
8. $\{LVECP\}=[M]\{q\}_1$

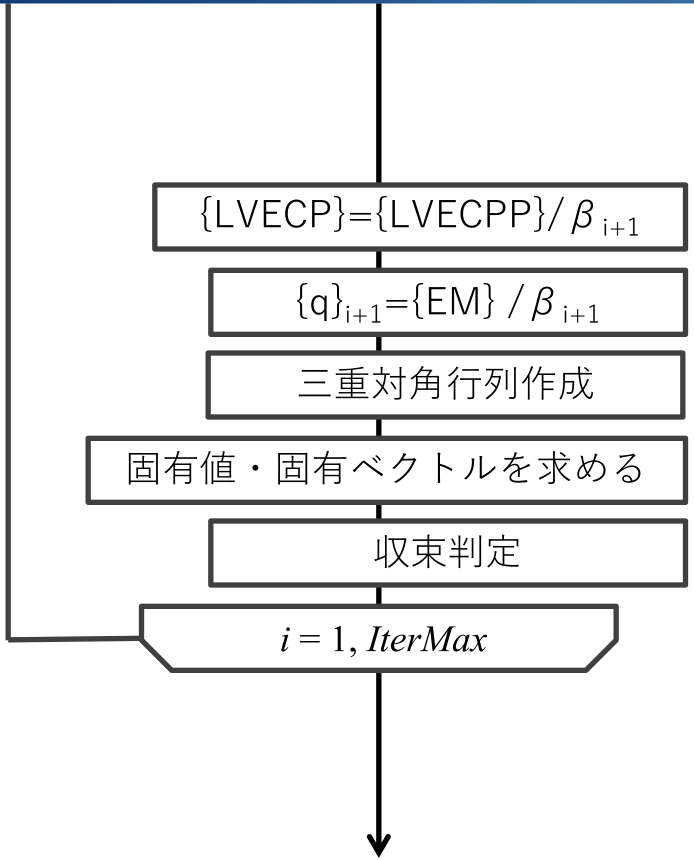
- fstr_solve_eigen.f90：L291～L318
- L61
- L113～L115
- L118～L123
- L125～L127
- L129～L145
- L147～L149
- L152

メイン関数：fstr_solve_eigen.f90 [2/4]



- L321
- L324～L339
- L341～L349
- L370
- L373～L374
- L384
- L386～L414
- L417
- L420～L429

メイン関数：fstr_solve_eigen.f90 [3/4]



- L433
- L433
- L435～L459
- L461～L462
- L464～L498
- L509

メイン関数：fstr_solve_eigen.f90 [4/4]

- 固有値算出
- 固有ベクトル算出
- 固有ベクトル正規化
- 有効質量・刺激係数算出
- 結果出力 (.res)
- 結果可視化 (visualizer)

- L511～L519
- L521～L538
- L540～L575
- L577～L611
- L614～L642
- L644～L668

まとめ

- 固有値問題の概略について解説を行いました
- 固有値問題の数理的な基礎について解説を行いました
- FrontISTRに実装されている固有値解析プログラムについて解説を行いました

展望

- 固有値問題解析プログラムの構造化（実施中）
- ブロックランチョス法の実装
    - 重根を正しく算出できる
- その他リスタート手法の実装検討