非線形有限要素法特論

2004 年 12 月 13 日

非線形有限要素法特論

- 講義内容は，非線形有限要素法の解説
- 夏学期の,「非線形有限要素法の基礎」を受講していることが望まれる.
- 受講していない場合は,「非線形有限要素法のためのテンソル解析の基礎」久田俊明著，丸善を読んで理解しておくこと.
- 講義資料はhttp://www.sml.k.u-tokyo.ac.jp/members/nabe/lecture2004からダウンロードできるようにします。講義前日までに確定しますので各自プリントアウトして持参してください。
- http://www.sml.k.u-tokyo.ac.jp/members/nabe/lecture2003 から昨年度の講義ノートがダウンロードできます。講義名が「有限要素法特論」ですが、基本的に同じ内容です。
- 今年度（２００４）から新設した演習は、翌週の講義時間に提出してください。必須ではありませんし、採点しませんが、実際に手を動かして計算することは有限要素法の理解を深める上で重要です。
- 質問などは，nabe@sml.k.u-tokyo.ac.jp まで.

非線形有限要素法特論講義予定

1.	10/ 4	微分方程式の境界値問題の有限要素解析
2.	10/18	線形弾性体の有限要素解析
3.	10/25	アイソパラメトリックソリッド要素 (プログラム)
4.	11/ 1	連立一次方程式の数値解法と境界条件処理（演習あり）
5.	11/ 8	線形有限要素法の基本的なプログラム構造 (プログラム)
6.	11/15	幾何学非線形問題の有限要素定式化１
7.	11/22	幾何学非線形問題の有限要素定式化２
8.	11/29	超弾性体、弾塑性体
9.	12/ 6	休講
10.	12/13	非線形方程式の動的解析手法、固有値解析、構造要素
11.	12/20	連立一次方程式の数値解法 — skyline 法、反復法
12.	1/17	ALE 有限要素流体解析
13.	1/24	ALE 有限要素流体解析

動的解析手法

- 時刻 $t+\Delta t$ での運動方程式

$$\boldsymbol{M}\cdot{}^{t+\Delta t}\ddot{\boldsymbol{u}}+\boldsymbol{C}\cdot{}^{t+\Delta t}\dot{\boldsymbol{u}}+{}^{t+\Delta t}\boldsymbol{Q}={}^{t+\Delta t}\boldsymbol{F} \tag{1}$$

- $\boldsymbol{M}$ は質量マトリックス，$\boldsymbol{C}$ は減衰マトリックス
- ここでは，この方程式をそのままの形で時間方向に積分する直接時間積分法についてのべる.
- 線形問題では，固有モードの重ね合わせで解析する場合もあり，モード重ね合わせ法という.
- 時刻 t での解が得られているとき，この解を基にして $t+\Delta t$ の解を厳密に求める方法を陰解法（線形加速度法, Newmark-β 法など），t の解を基に予測する方法を陽解法（中央差分）という
- 通常は $\boldsymbol{M}, \boldsymbol{C}$ は時刻によらず一定．しかし $\boldsymbol{Q}$ は変化する
- 内力ベクトルについて線形化し，Newton-Raphson 法を用いる.

$$\boldsymbol{M}\cdot{}^{t+\Delta t}\ddot{\boldsymbol{u}}^{(k)}+\boldsymbol{C}\cdot{}^{t+\Delta t}\dot{\boldsymbol{u}}^{(k)}+{}^{t+\Delta t}\boldsymbol{K}^{(k-1)}\Delta\boldsymbol{u}^{(k)}={}^{t+\Delta t}\boldsymbol{F}-{}^{t+\Delta t}\boldsymbol{Q}^{(k-1)} \tag{2}$$

$${}^{t+\Delta t}\boldsymbol{u}^{(k)}={}^{t}\boldsymbol{u}^{(k-1)}+\Delta\boldsymbol{u}^{(k)} \tag{3}$$

$${}^{t+\Delta t}\dot{\boldsymbol{u}}^{(k)}={}^{t}\dot{\boldsymbol{u}}^{(k-1)}+\Delta\dot{\boldsymbol{u}}^{(k)} \tag{4}$$

$${}^{t+\Delta t}\ddot{\boldsymbol{u}}^{(k)}={}^{t}\ddot{\boldsymbol{u}}^{(k-1)}+\Delta\ddot{\boldsymbol{u}}^{(k)} \tag{5}$$

- このままでは，未知量として $\Delta\boldsymbol{u}^{(k)}, \Delta\dot{\boldsymbol{u}}^{(k)}, \Delta\ddot{\boldsymbol{u}}^{(k)}$ が含まれるため，通常は，この三者を何らかの仮定の下に関係づけ，どれか１つの変数にまとめて解析する.

線形加速度法

- 線形加速度法は実際の解析では用いられることは少ない
- 文字通り時刻 t から $t + \Delta t$ までの加速度が線形に変化すると仮定する.

$$ {}^{t+\tau}\ddot{\boldsymbol{u}} = {}^{t}\ddot{\boldsymbol{u}} + \frac{\tau}{\Delta t}({}^{t+\tau}\ddot{\boldsymbol{u}} - {}^{t}\ddot{\boldsymbol{u}}) \tag{6} $$

- この式を τ を変数として積分し $\tau = \Delta t$ を代入すると

$$ {}^{t+\Delta t}\dot{\boldsymbol{u}} = {}^{t}\dot{\boldsymbol{u}} + \frac{\Delta t}{2}\left({}^{t+\Delta t}\ddot{\boldsymbol{u}} + {}^{t}\ddot{\boldsymbol{u}}\right) \tag{7} $$

$$ {}^{t+\Delta t}\boldsymbol{u} = {}^{t}\boldsymbol{u} + \Delta t\,{}^{t}\dot{\boldsymbol{u}} + \frac{\Delta t^2}{3}{}^{t}\ddot{\boldsymbol{u}} + \frac{\Delta t^2}{6}{}^{t+\Delta t}\ddot{\boldsymbol{u}} \tag{8} $$

- このとき,

$$ \Delta\dot{\boldsymbol{u}}^{(k)} = \frac{\Delta t}{2}\Delta\ddot{\boldsymbol{u}}^{(k)} \tag{9} $$

$$ \Delta\boldsymbol{u}^{(k)} = \frac{\Delta t^2}{6}\Delta\ddot{\boldsymbol{u}}^{(k)} \tag{10} $$

Newmark -β 法 1

- Newmark-β法は1959年Newmarkにより提案されてから, 動力学分野に幅広く応用されてきた.
- この手法は無条件安定時間積分法であるため, 大きな時間増分ステップΔtで動的解析を実行できる.
- また, 高次モードのみならず, 低次モードにも大きな数値減衰を導入することができる
- 時刻$t+\Delta t$での運動方程式は

$$\boldsymbol{M}\cdot{}^{t+\Delta t}\ddot{\boldsymbol{u}}+\boldsymbol{C}\cdot{}^{t+\Delta t}\dot{\boldsymbol{u}}+{}^{t+\Delta t}\boldsymbol{Q}={}^{t+\Delta t}\boldsymbol{F} \tag{11}$$

- Newmark-β 法では, 時刻$t+\Delta t$と時刻tでの変位, 速度の関係を次式のように仮定する.

$$^{t+\Delta t}\dot{\boldsymbol{u}}={}^{t}\dot{\boldsymbol{u}}+\Delta t\left[\gamma\,{}^{t+\Delta t}\ddot{\boldsymbol{u}}+(1-\gamma)\,{}^{t}\ddot{\boldsymbol{u}}\right] \tag{12}$$

$$^{t+\Delta t}\boldsymbol{u}={}^{t}\boldsymbol{u}+\Delta t\,{}^{t}\dot{\boldsymbol{u}}+\Delta t^2\left\{\left(\frac{1}{2}-\beta\right){}^{t}\ddot{\boldsymbol{u}}+\beta\,{}^{t+\Delta t}\ddot{\boldsymbol{u}}\right\} \tag{13}$$

Newmark -β 法 2

- Newmark-β 法では, 時刻 $t+\Delta t$ と時刻 t での変位, 速度の関係を次式のように仮定する.

$$ {}^{t+\Delta t}\dot{\boldsymbol{u}} = {}^{t}\dot{\boldsymbol{u}} + \Delta t \left[\gamma\, {}^{t+\Delta t}\ddot{\boldsymbol{u}} + (1-\gamma)\, {}^{t}\ddot{\boldsymbol{u}}\right] \tag{14} $$

$$ {}^{t+\Delta t}\boldsymbol{u} = {}^{t}\boldsymbol{u} + \Delta t\, {}^{t}\dot{\boldsymbol{u}} + \Delta t^2 \left\{\left(\frac{1}{2}-\beta\right) {}^{t}\ddot{\boldsymbol{u}} + \beta\, {}^{t+\Delta t}\ddot{\boldsymbol{u}}\right\} \tag{15} $$

- 上式で, $\gamma = \frac{1}{2}$, $\beta = \frac{1}{6}$ と置くと線形加速度法の式に一致する.
- 上式で, $\gamma = \frac{1}{2}$, $\beta = \frac{1}{4}$ と置くと, ${}^{t+\Delta t}\dot{\boldsymbol{u}}$ と ${}^{t+\Delta t}\boldsymbol{u}$ は次式のように与えられる.

$$ {}^{t+\Delta t}\dot{\boldsymbol{u}} = {}^{t}\dot{\boldsymbol{u}} + \frac{\Delta t}{2}({}^{t+\Delta t}\ddot{\boldsymbol{u}} + {}^{t}\ddot{\boldsymbol{u}}) \tag{16} $$

$$ {}^{t+\Delta t}\boldsymbol{u} = {}^{t}\boldsymbol{u} + \Delta t\,{}^{t}\dot{\boldsymbol{u}} + \frac{\Delta t^2}{4}({}^{t}\ddot{\boldsymbol{u}} + {}^{t+\Delta t}\ddot{\boldsymbol{u}}) \tag{17} $$

- この関係は実は加速度が時刻 t から $t+\Delta t$ の間で平均的な一定値

$$ {}^{t+\tau}\ddot{\boldsymbol{u}} = \frac{1}{2}({}^{t}\ddot{\boldsymbol{u}} + {}^{t+\Delta t}\ddot{\boldsymbol{u}}) \qquad (0 \le \tau \le \Delta t) \tag{18} $$

  をとるものと仮定し, これを積分して得られるものである. $\gamma = \frac{1}{2}$, $\beta = \frac{1}{4}$ の組合せは慣用的に台形則 (trapezoidal rule) と呼ばれる

Newmark -β 法 3

- Newmark-β 法の関係式を変形し, 時刻 $t+\Delta t$ での変位及び時刻 t での変位, 速度, 加速度を用いて, 時刻 $t+\Delta t$ での加速度, 速度を表すと次式のようになる.

$$ {}^{t+\Delta t}\ddot{\boldsymbol{u}} = \frac{1}{\beta \Delta t^2}({}^{t+\Delta t}\boldsymbol{u} - {}^{t}\boldsymbol{u}) - \frac{1}{\beta \Delta t}{}^{t}\dot{\boldsymbol{u}} - \left(\frac{1}{2\beta} - 1\right){}^{t}\ddot{\boldsymbol{u}} \tag{19} $$

$$ \begin{aligned} {}^{t+\Delta t}\dot{\boldsymbol{u}} &= {}^{t}\dot{\boldsymbol{u}} + \left\{(1-\gamma){}^{t}\ddot{\boldsymbol{u}} + \gamma\left[\frac{1}{\beta \Delta t^2}({}^{t+\Delta t}\boldsymbol{u} - {}^{t}\boldsymbol{u}) - \frac{1}{\beta \Delta t}{}^{t}\dot{\boldsymbol{u}} - (\frac{1}{2\beta} - 1){}^{t}\ddot{\boldsymbol{u}}\right]\right\}\Delta t \\ &= {}^{t}\dot{\boldsymbol{u}} + \Delta t(1-\gamma){}^{t}\ddot{\boldsymbol{u}} + \frac{\gamma}{\beta \Delta t}({}^{t+\Delta t}\boldsymbol{u} - {}^{t}\boldsymbol{u}) - \frac{\gamma}{\beta}{}^{t}\dot{\boldsymbol{u}} - \gamma\left(\frac{1}{2\beta} - 1\right)\Delta t^{t}\ddot{\boldsymbol{u}} \\ &= \frac{\gamma}{\beta \Delta t}({}^{t+\Delta t}\boldsymbol{u} - {}^{t}\boldsymbol{u}) + \left(1 - \frac{\gamma}{2\beta}\right){}^{t}\dot{\boldsymbol{u}} + \Delta t\left(1 - \frac{\gamma}{2\beta}\right){}^{t}\ddot{\boldsymbol{u}} \end{aligned} \tag{20} $$

- 線形問題の場合, 線形剛性マトリックス $\boldsymbol{K}$ を用いて内力 $\boldsymbol{Q}^{t+\Delta t}$ を表すと

$$ {}^{t+\Delta t}\boldsymbol{Q} = \boldsymbol{K}^{t+\Delta t}\boldsymbol{u} \tag{21} $$

- 線形系の Newmark-β 法の実行式

$$ \begin{aligned} &\left(\frac{1}{\beta \Delta t^2}\boldsymbol{M} + \frac{\gamma}{\beta \Delta t}\boldsymbol{C} + \boldsymbol{K}\right){}^{t+\Delta t}\boldsymbol{u} \\ &\quad = {}^{t+\Delta t}\boldsymbol{F} + \boldsymbol{M}\left[\frac{1}{\beta \Delta t^2}{}^{t}\boldsymbol{u} + \frac{1}{\beta \Delta t}{}^{t}\dot{\boldsymbol{u}} + \left(\frac{1}{2\beta} - 1\right){}^{t}\ddot{\boldsymbol{u}}\right] \\ &\qquad + \boldsymbol{C}\left[\frac{\gamma}{\beta \Delta t}{}^{t}\boldsymbol{u} + \left(\frac{\gamma}{\beta} - 1\right){}^{t}\dot{\boldsymbol{u}} + \left(\frac{\gamma}{2\beta} - 1\right)\Delta t^{t}\ddot{\boldsymbol{u}}\right] \end{aligned} \tag{22} $$

Newmark -β 法 4

- 線形系の Newmark-β 法の実行式

$$
\begin{aligned}
&\left(\frac{1}{\beta\Delta t^2}\boldsymbol{M}+\frac{\gamma}{\beta\Delta t}\boldsymbol{C}+\boldsymbol{K}\right){}^{t+\Delta t}\boldsymbol{u} \\
&\quad = {}^{t+\Delta t}\boldsymbol{F}+\boldsymbol{M}\left[\frac{1}{\beta\Delta t^2}{}^{t}\boldsymbol{u}+\frac{1}{\beta\Delta t}{}^{t}\dot{\boldsymbol{u}}+\left(\frac{1}{2\beta}-1\right){}^{t}\ddot{\boldsymbol{u}}\right] \\
&\qquad +\boldsymbol{C}\left[\frac{\gamma}{\beta\Delta t}{}^{t}\boldsymbol{u}+\left(\frac{\gamma}{\beta}-1\right){}^{t}\dot{\boldsymbol{u}}+\left(\frac{\gamma}{2\beta}-1\right)\Delta t\,{}^{t}\ddot{\boldsymbol{u}}\right] \qquad (23)
\end{aligned}
$$

- 通常の剛性マトリックスにかえて $\left(\frac{1}{\beta\Delta t^2}\boldsymbol{M}+\frac{\gamma}{\beta\Delta t}\boldsymbol{C}+\boldsymbol{K}\right)$ を用いれば線形解析のプログラムが利用できる.
- 線形系においては, $\gamma=\frac{1}{2}$, $\beta=\frac{1}{4}$ の場合, 時間ステップ Δt の値いかんによらず解は安定となる.
- 一方, $\gamma=\frac{1}{2}$, $\beta=\frac{1}{6}$ の場合は Δt がある値以下であれば, 解の安定性が保証されること, すなわち条件付安定であることを示すことができる.
- ただ, $\gamma>\frac{1}{2}$ とすると数値的な減衰効果を生じることが知られている.

Newmark -β 法 5

- 非線形問題に対して, 静的問題の場合と同様, 内力ベクトルについて線形化を行った次式に基づく Newton-Raphson 法の反復計算 $(k = 2, 3, \cdots)$ を行う.

$$\boldsymbol{M}^{t+\Delta t}\ddot{\boldsymbol{u}}^{(k)} + \boldsymbol{C}^{t+\Delta t}\dot{\boldsymbol{u}}^{(k)} + {}^{t+\Delta t}\boldsymbol{K}^{(k-1)}\Delta\boldsymbol{u}^{(k)} = {}^{t+\Delta t}\boldsymbol{F} - {}^{t+\Delta t}\boldsymbol{Q}^{(k-1)} \tag{24}$$

$$ {}^{t+\Delta t}\boldsymbol{u}^{(k)} = {}^{t+\Delta t}\boldsymbol{u}^{(k-1)} + \Delta\boldsymbol{u}^{(k)} \tag{25}$$

$$ {}^{t+\Delta t}\dot{\boldsymbol{u}}^{(k)} = {}^{t+\Delta t}\dot{\boldsymbol{u}}^{(k-1)} + \Delta\dot{\boldsymbol{u}}^{(k)} \tag{26}$$

$$ {}^{t+\Delta t}\ddot{\boldsymbol{u}}^{(k)} = {}^{t+\Delta t}\ddot{\boldsymbol{u}}^{(k-1)} + \Delta\ddot{\boldsymbol{u}}^{(k)} \tag{27}$$

ただし, 右肩符号 (k) は第 k 回目の反復であることを示す.

- 第一回目の反復計算では, 先に述べた線形の場合と同じになる.

- Newmark–β 法を用いて, 反復計算を実行する時, 変位を未知量とする場合には, 第 k 回目と $k-1$ 回目の反復における加速度と変位，速度の関係式の差をとり

$$\Delta\dot{\boldsymbol{u}}^{(k)} = \frac{\gamma}{\beta\Delta t}\Delta\boldsymbol{u}^{(k)} \tag{28}$$

$$\Delta\ddot{\boldsymbol{u}}^{(k)} = \frac{1}{\beta\Delta t^2}\Delta\boldsymbol{u}^{(k)} \tag{29}$$

- よって $\Delta \boldsymbol{u}^{(k)}$ を未知変数とする連立方程式

$$\left(\frac{1}{\beta \Delta t^2}\boldsymbol{M} + \frac{\gamma}{\beta \Delta t}\boldsymbol{C} + \boldsymbol{K}\right)\Delta \boldsymbol{u}^{(k)} = {}^{t+\Delta t}\boldsymbol{F} - {}^{t+\Delta t}\boldsymbol{Q}^{(k-1)} - \boldsymbol{M}\,{}^{t+\Delta t}\ddot{\boldsymbol{u}}^{(k-1)} - \boldsymbol{C}\,{}^{t+\Delta t}\dot{\boldsymbol{u}}^{(k-1)} \tag{30}$$

Newmark -β 法 6

- Newmark-β 法の実施手順は次の通りである.

1. 初期値の計算
   (a) 質量マトリックス $\boldsymbol{M}$ 及び 減衰マトリックス $\boldsymbol{C}$ を作る.
   (b) 以下の定数を計算する.
   - $a_0 = \frac{1}{\beta \Delta t^2}$ $\quad a_1 = \frac{\gamma}{\beta \Delta t}$ $\quad a_2 = \frac{1}{\beta \Delta t}$
   - $a_3 = \frac{1}{2\beta} - 1$ $\quad a_4 = \frac{\gamma}{\beta} - 1$ $\quad a_5 = \frac{\gamma}{2\beta} - 1$
   - $a_6 = \gamma \Delta t$ $\quad a_7 = (1-\gamma)\Delta t$
2. 各ステップの計算
   (a) 時刻 $t + \Delta t$ での有効剛性マトリックスを計算する.
   - $\boldsymbol{K}_{\mathrm{eff}} = a_0 \boldsymbol{M} + a_1 \boldsymbol{C} + \boldsymbol{K}$
   (b) 時刻 $t + \Delta t$ での有効荷重を計算する.
   - ${}^{t+\Delta t}\boldsymbol{F}_{\mathrm{eff}} = {}^{t+\Delta t}\boldsymbol{F} - {}^{t}\boldsymbol{Q} + \boldsymbol{M}(a_2{}^{t}\dot{\boldsymbol{u}} + a_3{}^{t}\ddot{\boldsymbol{u}}) + \boldsymbol{C}(a_4{}^{t}\dot{\boldsymbol{u}} + a5\ddot{\boldsymbol{u}})$
   (c) 時刻 $t + \Delta t$ の変位 ${}^{t+\Delta t}\boldsymbol{u}$ を求める.
   - $\boldsymbol{K}_{\mathrm{eff}}\Delta \boldsymbol{u} = {}^{t}\boldsymbol{F}_{\mathrm{eff}}$ $\quad {}^{t+\Delta t}\boldsymbol{u} = {}^{t}\boldsymbol{u} + \Delta \boldsymbol{u}$
   (d) 非線形問題ならば, 次のように反復計算を行う.
   i. $\Delta U^{(0)} = \Delta U$, $i = 0$ と置く.
   ii. $i = i + 1$

iii. 第 $i-1$ 反復目の有効荷重を計算する.

- ${}^{t+\Delta t}\boldsymbol{F}_{\mathrm{eff}}^{(i-1)} = {}^{t+\Delta t}\boldsymbol{F} - \boldsymbol{M}^{t+\Delta t}\ddot{\boldsymbol{u}}^{(i-1)} - \boldsymbol{C}^{t+\Delta t}\dot{\boldsymbol{u}}^{(i-1)} - {}^{t+\Delta t}\boldsymbol{Q}^{(i-1)}$

iv. 第 i 反復目の変位増分を計算する.

- $\boldsymbol{K}_{\mathrm{eff}}\Delta\boldsymbol{u}^{(i)} = {}^{t+\Delta t}\boldsymbol{F}_{\mathrm{eff}}^{(i-1)}$

v. 一増分ステップ内の変位増分を計算する.

- $\Delta\boldsymbol{u} = \Delta\boldsymbol{u} + \Delta\boldsymbol{u}^{(i)}$

vi. もし 収束するなら, 時刻 $t+\Delta t$ での変位, 速度, 加速度を次式のように求める.

- ${}^{t+\Delta t}\ddot{\boldsymbol{u}} = a_3\Delta\boldsymbol{u} + a_4{}^{t}\dot{\boldsymbol{u}} + a_5{}^{t}\ddot{\boldsymbol{u}}$
- ${}^{t+\Delta t}\dot{\boldsymbol{u}} = {}^{t}\dot{\boldsymbol{u}} + a_6{}^{t}\ddot{\boldsymbol{u}} + a_7{}^{t+\Delta t}\ddot{\boldsymbol{u}}$
- ${}^{t+\Delta t}\boldsymbol{u} = {}^{t}\boldsymbol{u} + \Delta\boldsymbol{u}$

中央差分法1

- 陰解法では，変位，速度，加速度の式を Δt 間における変化を何らかの仮定に基づいて近似したが，運動方程式自体は，時刻 $t+\Delta t$ のものを用いた.
- これに対し陽解法は時刻 t の運動方程式を用いて時刻 $t+\Delta t$ の解を近似的に評価する方法といえる.
- 代表例として中央差分法を紹介する.
- 中央差分法は二次精度を持つ時間積分法であり, 連立方程式を解く必要がなく, 定式が非常に容易であるため, 流体, 構造の動力学で幅広く用いられている.
- 中央差分法では時間区間 $[t,\, t+\Delta t]$ において, 速度が一定であることを仮定する
- この速度を $\dot{\boldsymbol{u}}^{t+\Delta t/2}$ で表せば 変位 $\boldsymbol{u}$, 速度 $\dot{\boldsymbol{u}}$ と加速度 $\ddot{\mathrm{u}}$ の関係が次のようになる.

$$\dot{\boldsymbol{u}}^{t+\Delta t/2} = \frac{\boldsymbol{u}^{t+\Delta t} - \boldsymbol{u}^{t}}{\Delta t} \tag{31}$$

$$\ddot{\boldsymbol{u}}^{t} = \frac{\dot{\boldsymbol{u}}^{t+\Delta t/2} - \dot{\boldsymbol{u}}^{t-\Delta t/2}}{\Delta t} \tag{32}$$

- 時刻 t での速度 $\dot{\boldsymbol{u}}^{t}$ は

$$\dot{\boldsymbol{u}}^{t} = \frac{\dot{\boldsymbol{u}}^{t+\Delta t/2} + \dot{\boldsymbol{u}}^{t-\Delta t/2}}{\Delta t} \tag{33}$$

中央差分法2

- この関係を運動方程式

$$\boldsymbol{M} \cdot {}^t\ddot{\boldsymbol{u}} + \boldsymbol{C} \cdot {}^t\dot{\boldsymbol{u}} + {}^t\boldsymbol{Q} = {}^t\boldsymbol{F} \tag{34}$$

に代入して整理すると, 速度 $\dot{\boldsymbol{u}}^{t+\Delta t/2}$ は次式のようになる.

$$\dot{\boldsymbol{u}}^{t+\Delta t/2} = \left(\frac{\boldsymbol{M}}{\Delta t} + \frac{\boldsymbol{C}}{2}\right)^{-1} \left[(\boldsymbol{F}^t - \boldsymbol{Q}^t(\boldsymbol{u}^t)) + \left(\frac{\boldsymbol{M}}{\Delta t} - \frac{\boldsymbol{C}}{2}\right)\dot{\boldsymbol{u}}^{t-\Delta t/2}\right] \tag{35}$$

- 変位の関係式から

$$\boldsymbol{u}^{t+\Delta t} = \boldsymbol{u}^t + \Delta t \dot{\boldsymbol{u}}^{t+\Delta t/2} \tag{36}$$

- これより，時刻 $t+\Delta t$ での変位 $\boldsymbol{u}^{t+\Delta t}$ と時刻 t での加速度 $\ddot{\boldsymbol{u}}^t$ が求められる.
- 式 (35) において, もし $\frac{\boldsymbol{M}}{\Delta t} + \frac{\boldsymbol{C}}{2}$ が対角マトリックスであるとするならば, 連立方程式を解くことなく, ベクトルの計算のみによって $\dot{\boldsymbol{u}}^{t+\Delta t/2}$ が求められることが分かる.
- マトリックスの乗算や連立一次方程式の解法の効率が格段に増し, また計算機の記憶の容量も少なくなるため, 通常 $\boldsymbol{M}$ としては集中質量マトリックス (lumped mass matrix) が使用され, 連立方程式の求解操作を必要とせず解を求めることができる.
- なお, 集中化された質量マトリックスを用いると, 質量集中化による周波数低減効果が中央差分法の周波数増大効果を相殺し, 結果として数値的な精度が向上することが知られている.

- 中央差分法はアルゴリズムが単純であるため, 1ステップあたりの計算時間が短いだけではなくベクトル計算機にのりやすいという利点もある.
- その反面時間積分において時間増分 Δt をある限界値を越えて大きくとると解が桁違いに不合理な値を取り発散に至る場合がある. このような不安定現象を時間増分ステップ Δt を十分小さくとることで回避することができる.
- なお, 第一ステップの計算では $\dot{\boldsymbol{u}}^{-\Delta t/2}$ の値を必要とするが, 時刻 $t = 0$ での速度 $\dot{\boldsymbol{u}}^0$ を既知とする.
- これは $\dot{\boldsymbol{u}}^0 = \mathbf{0}$ である場合

$$\dot{\boldsymbol{u}}^{-\Delta t/2} = -\dot{\boldsymbol{u}}^{\Delta t/2} \tag{37}$$

- 第一ステップでの計算式は

$$\dot{\boldsymbol{u}}^{\Delta t/2} = \Delta t \boldsymbol{M}^{-1}(\boldsymbol{F}^t - \boldsymbol{Q}^t(\boldsymbol{u}^t))/2 \tag{38}$$

中央差分法 3

- 中央差分法の実施手順は次の通りである.

1. 初期値の計算
   (a) 質量マトリックス $\boldsymbol{M}$ 及び 減衰マトリックス $\boldsymbol{C}$ を作る.
   (b) 時間ステップ Δt を決める.
   (c) 有効質量マトリックスを計算する. $\boldsymbol{M}_{\text{eff}} = \frac{\boldsymbol{M}}{\Delta t} + \frac{\boldsymbol{C}}{2}$
   (d) 時刻 0 での変位 ${}^0\boldsymbol{u}$, 速度 ${}^0\dot{\boldsymbol{u}}$ 及び加速度 ${}^0\ddot{\boldsymbol{u}}$ を設定し, 時刻 Δt での変位を求める.
2. 各ステップの計算
   (a) 時刻 t での有効荷重を計算する.
   $$\boldsymbol{F}^t_{\text{eff}} = \boldsymbol{F}^t - \boldsymbol{Q}^t(\boldsymbol{u}^t) + \left(\frac{\boldsymbol{M}}{\Delta t} - \frac{\boldsymbol{C}}{2}\right)\dot{\boldsymbol{u}}^{t-\Delta t/2}$$
   (b) 時刻 $t + \Delta t/2$ での速度 $\dot{\boldsymbol{u}}^{t+\Delta t/2}$ を求める.
   $$\dot{\boldsymbol{u}}^{t+\Delta t/2} = \boldsymbol{M}^{-1}_{\text{eff}} \cdot \boldsymbol{F}^t_{\text{eff}}$$
   (c) 時刻 $t + \Delta t$ での変位 $\boldsymbol{u}^{t+\Delta t}$ を求める. 必要があれば時刻 t での加速度 $\ddot{\boldsymbol{u}}^t$ も求める.

- 本手法は一次連立方程式の求解操作をせずに運動方程式を解くため, 計算時間が節約できる反面, Δt を十分小さくとらないと解の安定性が保証されない欠点も併せ持つ.

質量マトリックス 1

- 有限要素法で用いる質量マトリックスには, consistant 質量マトリックスと集中 (lumped) 質量マトリックスの二種類がある. 以下にそれらについて説明する.

- consistant 質量マトリックスとは，仮想仕事式に現れる慣性力の項をそのまま離散化して得られる質量マトリックスのこと

- 慣性力による仮想仕事は, ρ_0, ρ_t をそれぞれ時刻 $0, t$ における質量密度とすれば

$$\int_V \delta \boldsymbol{u} \cdot \rho_0 \ddot{\mathbf{u}} dV = \int_{{}^t v} \delta \boldsymbol{u} \cdot \rho_t \ddot{\mathbf{u}} d^t v = \delta \boldsymbol{U}^t \boldsymbol{M} \ddot{\boldsymbol{U}} \tag{39}$$

  となる．式 (39) から, 通常の有限要素離散化を行うことによって, consistant 質量マトリックスが得られる.

- 集中 (lumped) 質量マトリックスその名のとおり節点に質量, あるいは回転質量を集中させるものであり, consistant 質量マトリックスが, フルマトリックスであるのに対して, lumped 質量マトリックスは対角マトリックスとなる.

- したがって陽的動解析手法においては, マトリックスの乗算や連立一次方程式の解法の効率が格段に増し, また計算機の記憶容量も少なくなるため, lumped 質量マトリックスが使用される場合が多い.

質量マトリックス 1

- lumped 質量マトリックスは, 要素全体の質量, $\int_{V_e} N^i dV_e$ を求めた後に適当な方法で節点に質量を分配するものである. lumped 質量マトリックスを求める方法は幾つかある

1. $\int_{V_e} N^{(i)} dV$ （i は節点）の比で分配する
2. $\int_{V_e} N^{(i)} N^{(i)} dV$ （i は節点，総和規約に基づかない）の比で分配する
3. すべての節点に均等に分配
4. 中間節点に均等に分配（serendipity 族のみ，コーナーの節点は零）
5. consistent 質量マトリックスを作る方法で，積分点を節点位置にとり対角化する

固有値解析 1

- 動的解析を行う場合について、有効な情報が得られる
- 固有値解析を分類すると、
  - 標準型
$$A\boldsymbol{x} = \lambda \boldsymbol{x} \tag{40}$$
  - MK 型（振動問題はこのタイプ）
$$K\boldsymbol{x} = \lambda M\boldsymbol{x} \tag{41}$$
- MK 型は、L を下三角行列として、$M = LL^T$ のように三角分解して
$$\begin{aligned} K\boldsymbol{x} &= \lambda M\boldsymbol{x} \\ K\boldsymbol{x} &= \lambda LL^T\boldsymbol{x} \\ L^{-1}K\boldsymbol{x} &= \lambda L^T\boldsymbol{x} \end{aligned} \tag{42}$$

  $L^T\boldsymbol{x} = \boldsymbol{y}$ とおくと $\boldsymbol{x} = L^{-T}\boldsymbol{y}$
$$L^{-1}KL^{-T}\boldsymbol{y} = \lambda \boldsymbol{y} \tag{43}$$
  という標準型に変換できる．ここでは標準型のみ取り扱う．
- なお，実際にはこのような形で MK 型の固有値問題を取り扱うことはなく，直接取り扱うことができる．

固有値解析 2

- 固有値固有ベクトルを求める方法
  - 同時に求める
  - 固有値を先に求める
  - 固有ベクトルを先に求める
- 固有値が先に求められていれば，後述する反復法などで簡単に求めることができる．
- 固有ベクトルが求められていれば，レイリー商

$$R = \frac{\boldsymbol{x}^T A \boldsymbol{x}}{\boldsymbol{x}^T \boldsymbol{x}} = \frac{\boldsymbol{x}^T \lambda \boldsymbol{x}}{\boldsymbol{x}^T \boldsymbol{x}} = \lambda$$

の形で固有値が得られる

ヤコビ法

$\boldsymbol{Ax} = \lambda \boldsymbol{x}$ に正則なマトリックス $\boldsymbol{P}$,$\boldsymbol{Q}$ を用いて

1. 左から $\boldsymbol{P}$ をかける　　$\boldsymbol{PAx} = \lambda \boldsymbol{Px}$

2. $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{Qy}$ とすれば　　$\boldsymbol{PAQy} = \lambda \boldsymbol{PQy}$

今 $\boldsymbol{P}$,$\boldsymbol{Q}$ として

$$\boldsymbol{PAQ} = \begin{bmatrix} \lambda_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \lambda_n \end{bmatrix}, \boldsymbol{PQ} = \begin{bmatrix} 1 & & \\ & \ddots & \\ & & 1 \end{bmatrix} \tag{44}$$

となるように適当に選べば, 固有値は $\lambda_1 \ldots \lambda_n$ そのものであり, $\boldsymbol{Q}$ の各列が固有ベクトルになる.

ヤコビ法は $\boldsymbol{A}$ の成分のうち絶対値最大のものを A_{pq} として, $\boldsymbol{A}^{(2)} = \boldsymbol{P}^{(1)}\boldsymbol{AQ}^{(1)}$ により, $A_{pq}^{(2)} = 0$ となるようにする. 次に, $\boldsymbol{A}^{(2)}$ の成分のうち絶対値最大のものを $A_{rs}^{(2)}$ として, $\boldsymbol{A}^{(3)} = \boldsymbol{P}^{(2)}\boldsymbol{A}^{(2)}\boldsymbol{Q}^{(2)}$ により, $A_{pq}^{(3)} = 0$ となるようにする. これを順にくりかえし, 非対角項が十分小さくなったら, 収束したと判断し, 計算を打ち切る.

では、具体的な $\boldsymbol{P}$,$\boldsymbol{Q}$ の求め方はどうするかというと,

$$
\boldsymbol{P}^{(k)} = \begin{array}{cc}
 & \begin{array}{ccccccccccc} & & & p & & & & q & & & \end{array} \\
\begin{array}{c} \\ \\ \\ p \\ \\ \\ \\ q \\ \\ \\ \\ \end{array} &
\begin{pmatrix}
1 & & & & & & & & & & \\
 & \ddots & & \vdots & & & & \vdots & & 0 & \\
 & & 1 & & & & & & & & \\
 & \dots & & \cos\theta & & \dots & & \sin\theta & & \dots & \\
 & & & & 1 & & & & & & \\
 & & & \vdots & & \ddots & & \vdots & & & \\
 & & & & & & 1 & & & & \\
 & \dots & & -\sin\theta & & \dots & & \cos\theta & & \dots & \\
 & & & & & & & & 1 & & \\
 & 0 & & \vdots & & & & \vdots & & \ddots & \\
 & & & & & & & & & & 1
\end{pmatrix}
\end{array} \tag{45}
$$

$$
\boldsymbol{Q}^{(k)} = \begin{array}{cc}
 & \begin{array}{ccccccccccc} & & & p & & & & q & & & \end{array} \\
\begin{array}{c} \\ \\ \\ p \\ \\ \\ \\ q \\ \\ \\ \\ \end{array} &
\begin{pmatrix}
1 & & & & & & & & & & \\
 & \ddots & & \vdots & & & & \vdots & & 0 & \\
 & & 1 & & & & & & & & \\
 & \ldots & & \cos\theta & & \ldots & & -\sin\theta & & \ldots & \\
 & & & & 1 & & & & & & \\
 & & & \vdots & & \ddots & & \vdots & & & \\
 & & & & & & 1 & & & & \\
 & \ldots & & \sin\theta & & \ldots & & \cos\theta & & \ldots & \\
 & & & & & & & & 1 & & \\
 & 0 & & \vdots & & & & \vdots & & \ddots & \\
 & & & & & & & & & & 1
\end{pmatrix}
\end{array}
\tag{46}
$$

とすれば,

$$
\begin{aligned}
A_{pq}^{(k+1)} &= -A_{pp}\sin\theta\cos\theta - A_{qp}\sin^2\theta + A_{pq}\cos^2\theta + A_{qq}\sin\theta\cos\theta && (47) \\
&= -(A_{pp} - A_{qq})\sin\theta\cos\theta + A_{pq}(\cos^2\theta - \sin^2\theta) && (48)
\end{aligned}
$$

これより,

$$
\frac{1}{2}(A_{pp} - A_{qq})\sin 2\theta = A_{pq}\cos 2\theta \tag{49}
$$

$$
\tan 2\theta = \frac{2A_{pq}}{A_{pp} - A_{qq}} \tag{50}
$$

として, θ を求めることができる.

固有値を先に求める方法

スツルムの定理

対称マトリックス

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} A_{11} & \dots & A_{1n} \\ A_{21} & & \\ \vdots & & \\ A_{n1} & & A_{nn} \end{bmatrix} \tag{51}$$

の主座行列式とは, $\boldsymbol{A}$ の左上の k 行 k 列までの部分の行列式のことをいう．それを d_k で表す. 即ち

$$d_1 = A_{11}, d_2 = \begin{vmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{vmatrix}, d_3 = \begin{vmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} \end{vmatrix}, \tag{52}$$

$$\dots, d_k = \begin{vmatrix} A_{11} & A_{12} & \dots & A_{1k} \\ A_{21} & A_{22} & & A_{2k} \\ \vdots & & & \\ A_{k1} & A_{k2} & & A_{kk} \end{vmatrix}, \dots, d_n = det\boldsymbol{A} \tag{53}$$

さらに $d_0 = 1$ とする．ここで

$$d_0, d_1, d_2, \dots, d_n \tag{54}$$

という列を考え, 左から右に順に見ていったときの符号の変化（$d_i d_{i+1} < 0$ となること）の回数を N とすれば

定理１ A の固有値で負のものは N 個ある.

　また, $\boldsymbol{A} - \lambda \boldsymbol{I}$ の主座行列式を $d_0(\lambda), d_1(\lambda), \dots$ とし, $d_0(\lambda), d_1(\lambda), \dots d_n(\lambda)$ の符号変化の回数を $N(\lambda)$ とすると

定理２ $\boldsymbol{A}$ の固有値で λ より小さいものは $N(\lambda)$ 個ある

この性質を使って固有値を求める.

具体的には二分法などによる. 固有値を大きい方から $\lambda_1 \dots \lambda_n$ とする. 二つの数 a_i,b_i に対して（$a_i < b_i$）, $N(a_i) \geqq k, N(a_i) < k$ が成立しているとすると, 大きいほうから k 番目の固有値 λ_k は

$$a_i < \lambda_k < b_i$$

である.

例えば,

大きいほうから 3 番目の固有値は, $a_i \leq \lambda_3 \leq b_i$ である.

次にこの区間を二分して, 求めようとしている λ_k が含まれる範囲を縮小する. これを順にくり返して十分収束したら終了.

では、$d_0, d_1, \dots$ はどう求めるのか.

一般的な行列では難しいが, （計算量が多い）三重対角行列ならば簡単.

$$d_k(\lambda) = \begin{vmatrix} \alpha_1 - \lambda & \beta_1 & & & & \\ \beta_1 & \alpha_2 - \lambda & & & & \\ & & \ddots & & & \\ & & & \alpha_{k-2} - \lambda & \beta_{k-2} & \\ & & & \beta_{k-2} & \alpha_{k-1} - \lambda & \beta_{k-1} \\ & & & & \beta_{k-1} & \alpha_k - \lambda \end{vmatrix} \tag{55}$$

これを最後の行で余因子展開すると,

$$d_k(\lambda) = (-1)^{k+k}(\alpha_k - \lambda)\underbrace{\begin{vmatrix} \alpha_1-\lambda_1 & \beta_1 & & & \\ \beta_1 & \alpha_2-\lambda & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & \alpha_{k-2}-\lambda & \beta_{k-2} \\ & & & \beta_{k-2} & \alpha_{k-1}-\lambda \end{vmatrix}}_{d_{k-1}(\lambda)} \tag{56}$$

$$+ (-1)^{k+k-1}\beta_{k-1}\begin{vmatrix} \alpha_1-\lambda & \beta_1 & & & \\ \beta_1 & \alpha_2-\lambda & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & \alpha_{k-2}-\lambda & \\ & & & \beta_{k-2} & \beta_{k-1} \end{vmatrix} \tag{57}$$

この最後の第 2 項目を最後の列で展開すると,

$$\begin{vmatrix} \alpha_1-\lambda & & & & & \\ & \alpha_2-\lambda & & & & \\ & & \ddots & & & \\ & & & \ddots & \beta_{k-3} & \\ & & & \beta_{k-3} & \alpha_{k-2}-\lambda & \\ & & & & \beta_{k-2} & \beta_{k-1} \end{vmatrix} = (-1)^{(k-1)+(k+1)}\beta_{k-1}\underbrace{\begin{vmatrix} \alpha_1-\lambda & & & & \\ & \alpha_2-\lambda & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & \ddots & \beta_{k-3} \\ & & & \beta_{k-3} & \alpha_{k-2}-\lambda \end{vmatrix}}_{d_{k-2}(\lambda)} \tag{58}$$

以上をまとめると

$$d_k(\lambda) = (\alpha_k - \lambda)d_{k-1}(\lambda) - {\beta_{k-1}}^2 d_{k-2}(\lambda) \tag{59}$$

となる. では, どのように三重対角行列にするのか？

鏡像変換

空間の点 $\boldsymbol{x}$ を平面 U（法線 $\boldsymbol{u}$）に関して対称な点 $\boldsymbol{x}'$ に移すような変換は下式で与えられる.

$$\boldsymbol{x}' = (\boldsymbol{I} - 2\boldsymbol{u}\boldsymbol{u}^T)\boldsymbol{x} \tag{60}$$

証明：$\boldsymbol{x}$ と $\boldsymbol{x}'$ を結ぶベクトル $\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}'$ は

$$\begin{aligned} \boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}' &= \boldsymbol{x} - (\boldsymbol{I} - 2\boldsymbol{u}\boldsymbol{u}^T)\boldsymbol{x} && (61) \\ &= 2\boldsymbol{u}\boldsymbol{u}^T\boldsymbol{x} && (62) \end{aligned}$$

であり, $\boldsymbol{u}^T\boldsymbol{x}$ はスカラーなので $\boldsymbol{u}$ に並行.

$\boldsymbol{x}$,$\boldsymbol{x}'$ の中点は

$$\boldsymbol{x} - \boldsymbol{u}\boldsymbol{u}^T\boldsymbol{x}$$

となるが, これは $\boldsymbol{u}$ と直交する.

$$\begin{aligned} (\boldsymbol{u}, \boldsymbol{x} - \boldsymbol{u}\boldsymbol{u}^T\boldsymbol{x}) &= \boldsymbol{u}^T\boldsymbol{x} - (\boldsymbol{u}^T\boldsymbol{u})(\boldsymbol{u}^T\boldsymbol{x}) && (63) \\ &= 0 && (64) \end{aligned}$$

この変換を $\boldsymbol{P}$ で表す.

$$\boldsymbol{P} = \boldsymbol{I} - 2\boldsymbol{u}\boldsymbol{u}^T$$

$\boldsymbol{P}$ は対称行列である. また, 鏡像変換を 2 回行えばもとに戻ることから

$$\boldsymbol{P}\boldsymbol{P} = \boldsymbol{I}$$

これより

$$\boldsymbol{P}\boldsymbol{P}^T = \boldsymbol{I}$$

まとめると
$||\boldsymbol{x}|| = ||mby||$ であるような任意の 2 つのベクトル $\boldsymbol{x}$,$\boldsymbol{y}$ に対し

$$\boldsymbol{P}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{y} \tag{65}$$

$$\boldsymbol{P} = \boldsymbol{I} - 2\boldsymbol{u}\boldsymbol{u}^T \tag{66}$$

$$\boldsymbol{u} = \frac{(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y})}{||\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}||} \tag{67}$$

$\boldsymbol{P}$ は対称な直交行列である.
この鏡像変換を用いて $\boldsymbol{A}$ を三重対角化する.

ハウスホルダー変換

$\boldsymbol{A}$ を三角対角にする.

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} A_{11} & \dots & A_{1n} \\ A_{21} & & \\ \vdots & & \\ A_{n1} & & A_{nn} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{a}_1 & \boldsymbol{a}_2 & \dots & \boldsymbol{a}_n \end{bmatrix}, \boldsymbol{a}_k = \begin{bmatrix} a_{1k} \\ \\ \vdots \\ \\ a_{nk} \end{bmatrix} \tag{68}$$

$$\boldsymbol{P}^{(1)}\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{P}\boldsymbol{a}_1 & \boldsymbol{P}\boldsymbol{a}_2 & \dots & \boldsymbol{P}\boldsymbol{a}_n \end{bmatrix} \tag{69}$$

ここで $\boldsymbol{P}^{(1)}\boldsymbol{a}_1 = \begin{bmatrix} \boldsymbol{A}_{11} \\ s \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}$ という形になるようにしたい.

$\boldsymbol{P}^{(1)} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \ \dots \ 0 \\ 0 & \\ \vdots & \begin{bmatrix} \tilde{\boldsymbol{P}}^{(1)} \end{bmatrix} \\ 0 & \end{bmatrix}$ という形式で $\begin{bmatrix} \tilde{\boldsymbol{P}}^{(1)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{A}_{21} \\ \vdots \\ \boldsymbol{A}_{n1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} s \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}$ となればよい.

$\begin{bmatrix} \boldsymbol{A}_{21} \\ \vdots \\ \vdots \\ \boldsymbol{A}_{n1} \end{bmatrix}$ を $\begin{bmatrix} s \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}$ に変換するような $\tilde{\boldsymbol{P}}^{(1)}$ は，鏡像変換を用いることにより以下のように求められる.

(1) まず2つのベクトルの長さをそろえる．即ち $s^2 = \boldsymbol{A}_{21}^2 + \boldsymbol{A}_{31}^2 + \ldots + \boldsymbol{A}_{n1}^2$

(2) $\boldsymbol{u} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{A}_{21} - s \\ \boldsymbol{A}_{31} \\ \vdots \\ \boldsymbol{A}_{n1} \end{bmatrix}$ として，$\tilde{\boldsymbol{P}}^{(1)} = \boldsymbol{I} - 2\boldsymbol{u}\boldsymbol{u}^{\boldsymbol{T}}$ この $\boldsymbol{P}^{(1)}$ を用いると，以下のようになる．

$$\boldsymbol{P}^{(1)}\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{A}_{11} & \boldsymbol{A}_{12} \ \ldots \ \boldsymbol{A}_{1n} \\ s & \\ 0 & \begin{bmatrix} \\ \text{一般に非零} \\ \\ \end{bmatrix} \\ 0 & \\ 0 & \end{bmatrix} \tag{70}$$

$$\boldsymbol{P}^{(1)}\boldsymbol{A}\boldsymbol{P}^{(1)} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{A}_{11} & \boldsymbol{A}_{12} \ \ldots \ \boldsymbol{A}_{1n} \\ s & \\ 0 & \begin{bmatrix} \\ \quad\quad\quad \\ \\ \end{bmatrix} \\ \vdots & \\ 0 & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \ \ldots \ \ldots \ 0 \\ 0 & \\ \vdots & \begin{bmatrix} \\ \tilde{\boldsymbol{P}}^{(1)} \\ \\ \end{bmatrix} \\ \vdots & \\ 0 & \end{bmatrix} \tag{71}$$

$$= \begin{bmatrix} \boldsymbol{A}_{11} & s \ \ 0 \ \ldots \ 0 \\ s & \\ 0 & \begin{bmatrix} \\ \quad\quad\quad \\ \\ \end{bmatrix} \\ \vdots & \\ 0 & \end{bmatrix} \tag{72}$$

$$\tag{73}$$

となる．以下順にくり返せば三角対角にすることができる．

べき乗法 –固有ベクトルを先に求める

出発ベクトル $\boldsymbol{x}^{(0)}$ を適当に取り、

$$\boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^{(k)}$$

の形で反復計算を行えば,

$$\frac{\boldsymbol{x}^{(1)}}{\|\boldsymbol{x}^{(1)}\|}, \frac{\boldsymbol{x}^{(2)}}{\|\boldsymbol{x}^{(2)}\|}, \ldots \tag{74}$$

は，絶対値最大の固有値に対応する固有ベクトルに収束する．

ここでは，固有値に重複のない場合のみを考える．

$$\|\lambda_1\| > \|\lambda_2\| > \|\lambda_3\| > \ldots > \|\lambda_n\|$$

また，それぞれに対応する固有ベクトルを

$$\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \boldsymbol{x}_3, \ldots, \boldsymbol{x}_n$$

とする．$\boldsymbol{x}_1 \sim \boldsymbol{x}_n$ は，n 次元空間の直交基底になるので任意のベクトル $\boldsymbol{x}^{(0)}$ は以下のように一意に表すことができる．

$$\boldsymbol{x}^{(0)} = \alpha_1\boldsymbol{x}_1 + \alpha_2\boldsymbol{x}_2 + \ldots + \alpha_n\boldsymbol{x}_n$$

これに $\boldsymbol{A}$ をかけると

$$\begin{aligned} \boldsymbol{x}^{(1)} &= \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^{(0)} && (75)\\ &= \alpha_1\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_1 + \alpha_2\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_2 + \ldots + \alpha_n\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_n && (76)\\ &= \alpha_1\lambda_1\boldsymbol{x}_1 + \alpha_2\lambda_2\boldsymbol{x}_2 + \ldots + \alpha_n\lambda_n\boldsymbol{x}_n && (77) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \boldsymbol{x}^{(2)} &= \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^{(1)} && (78)\\ &= \alpha_1\lambda_1^2\boldsymbol{x}_1 + \alpha_2\lambda_2^2\boldsymbol{x}_2 + \ldots + \alpha_n\lambda_n^2\boldsymbol{x}_n && (79) \end{aligned}$$

一般に以下のようになる．

$$\boldsymbol{x}^{(k)} = \lambda_1^k \{ \alpha_1 \boldsymbol{x}_1 + \alpha_2 \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right)^k + \ldots + \alpha_n \left(\frac{\lambda_n}{\lambda_1} \right)^k \boldsymbol{x}_n \}$$

これを順にくりかえし，$\boldsymbol{x}^{(k)}$ が十分収束するまで続ける．

しかしながら，最大固有値ではなく，最小固有値に興味がある場合（一般に構造物の振動問題を考える場合はこれに相当），あるいは，ある値の近くの固有値に興味がある場合はどうするか？

逆反復法

$\boldsymbol{A}$ の固有値　$\lambda_1, \dots, \lambda_n$

$\boldsymbol{A}^{-1}$ の固有値 $\frac{1}{\lambda_1}, \dots, \frac{1}{\lambda_n}$

また，固有ベクトルは一致する．

λ_n が最小ならば $\frac{1}{\lambda_n}$ は $\boldsymbol{A}^{-1}$ の最大固有値である．従って、$\boldsymbol{A}^{-1}$ に対して反復法を適用すればよい．

$\boldsymbol{A}^{-1}$ は求める必要はない．

$$\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{x}^{(0)} = \boldsymbol{x}^{(1)} \tag{80}$$

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^{(0)} = \boldsymbol{x}^{(0)} \tag{81}$$

$\boldsymbol{x}^{(1)}$ は連立一次方程式を解くことによって求められる．さらに，連立一次方程式の解法として Gauss の消去法に基づく直接解法を用いるならば，時間がかかる三角分解は 1 回行うだけでよく，効率よく計算できる．

では，ある値 α に最も近い固有値に対応した固有ベクトルはどのように求めるのか．

$\boldsymbol{A} - \alpha\boldsymbol{I}$ の固有値は，$\lambda_1 - \alpha, \lambda_2 - \alpha, \dots, \lambda_n - \alpha$ である．

$(\boldsymbol{A} - \alpha\boldsymbol{I})^{-1}$ の固有値は，$\frac{1}{\lambda_1 - \alpha}, \frac{1}{\lambda_2 - \alpha}, \dots, \frac{1}{\lambda_n - \alpha}$

α に最も近い固有値を λ_k とおけば，$(\boldsymbol{A} - \alpha\boldsymbol{I})^{-1}$ の最大固有値は $\frac{1}{\lambda_k - \alpha}$ である．従って、$\boldsymbol{A} - \alpha\boldsymbol{I}$ に逆反復法を適用すればよい．

同時反復法

いくつかのベクトルを組にして，それにべき乗法または逆反復法を適用すると，複数の固有ベクトルを求めることができる．

具体的には，$\boldsymbol{A}$ の固有ベクトルは互いに直交しているので，互いに直交する出発ベクトル $\boldsymbol{x}_1^{(0)}, \boldsymbol{x}_2^{(0)}, \ldots, \boldsymbol{x}_n^{(0)}$ を適当にとる．ただし，現実的に $m << n$ でなければならない．

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_j^{(0)} = \boldsymbol{y}_j^{(0)}(j = 1, \ldots, m)$$

として，$\boldsymbol{y}_j^{(0)}$ を計算するが，このままではすべて絶対値最大の固有値に対応した固有ベクトルに収束してしまうので，$\boldsymbol{x}_j^{(1)}$ は，$\boldsymbol{x}_k^{(1)}(k = 1, \ldots, j-1)$ と直交させて次に進むようにする．このようにすれば $\boldsymbol{x}_1$ は何も変更されないので絶対値最大の固有値に対応した固有ベクトルに収束し，$\boldsymbol{x}_2$ は $\boldsymbol{x}_1$ とは直交する空間で反復するので，2 番目の固有値に対応した固有ベクトルに収束する．

直交化の方法

グラム・シュミットの直交化

$$\boldsymbol{x}_1 = \boldsymbol{y}_1 \tag{82}$$

$$\boldsymbol{x}_2 = \boldsymbol{y}_2 - C_{21}\boldsymbol{x}_1 \tag{83}$$

$$\boldsymbol{x}_3 = \boldsymbol{y}_3 - C_{31}\boldsymbol{x}_1 - C_{32}\boldsymbol{x}_2 \tag{84}$$

$$\vdots \tag{85}$$

$$\boldsymbol{x}_m = \boldsymbol{y}_m - C_{m1}\boldsymbol{x}_1 - \ldots - C_{m,m-1}\boldsymbol{x}_{m-1} \tag{86}$$

$$\tag{87}$$

$$C_{ij} = \frac{\boldsymbol{x}_j^{\boldsymbol{T}}\boldsymbol{y}_i}{\boldsymbol{x}_j\boldsymbol{x}_j} \tag{88}$$