はじめに・有限要素法入門（Ｉ）

2012年夏学期

中島 研吾

科学技術計算Ｉ（4820-1027）・コンピュータ科学特別講義Ｉ（4810-1204）

本日の講義

- 本講義の目的，背景等
- 有限要素法とは?
- 講義の予定，評価方針など

はじめに

- 科学技術計算Ｉ（4820-1027）
  - 情報理工学系数理情報学専攻
- コンピュータ科学特別講義Ｉ（4810-1204）
  - 情報理工学系コンピュータ科学専攻

- 内容
  - 有限要素法プログラミング入門
  - 少々複雑な歴史がある（後述）

担当教員

- 中島研吾
  - 情報基盤センタースーパーコンピューティング研究部門
    - 大学院情報理工学系研究科数理情報学専攻　兼担
  - 工学部航空学科（現航空宇宙工学科）卒
  - （FY.2004～2007）理学系研究科地球惑星科学専攻
- 専門
  - 計算力学，数値流体力学
  - 数値線形代数
  - 並列プログラミングモデル，並列アルゴリズム
- 情報基盤センター別館3F，内線：27219
- nakajima@cc.u-tokyo.ac.jp
- 質問等は随時，e-mail・電話で所在確認
- http://nkl.cc.u-tokyo.ac.jp/12s/

本講義の概要（1/2）

- 有限要素法
  - 偏微分方程式の数値解法
  - 様々な科学技術分野のシミュレーションに使用
- 有限要素法の「理解」
  - 有限要素法が様々な理論・技術（それぞれは難解なものではない）から成立している
    - 背景となる基礎的な理論
    - 実用的なプログラムの作成法
    - 連立一次方程式解法などの周辺技術
  - 個々の要素のローカルなオペレーションの集積によって全体系が構成される
  - プログラミングの実習
    - 情報基盤センター教育用計算機システム（ECCS2012）

本講義の概要（2/2）

- 題材
  – 一次元及び三次元弾性力学

- 本講義・実習は，科学技術計算プログラミングに必須の項目である「SMASH（Science-Modeling-Algorithm-Software-Hardware）」を，できるだけ幅広くカバーし，広い視野を持った人材を育成することを目標とする

本講義の実施項目

- 有限要素法入門
- 弾性力学入門
- 反復法による連立一次方程式解法
- 一次元弾性力学計算コード
- 三次元弾性力学計算コード

背 景（1/2）

- 有限要素法は計算機と深い関係にあり，計算機の発展とともに進歩してきた分野
  - 本学で実施されている有限要素法関連の講義は，理論，アルゴリズムに関する教育が中心で，プログラミングまでカバーしているものはほとんど無い
- 有限要素法は最終的には疎行列を係数とする大規模な連立一次方程式を解くことに帰着される
  - 疎行列を係数とする行列解法と密接な関係を持っている
    - 有限要素法を学ぶためには，背景となる物理，変分法などの基礎的な理論の他に，疎行列解法，特にプログラミングのためには疎行列の係数格納法に習熟することが不可欠
  - 疎行列解法まで含んだ教育を実施している講義は無い

背 景（2/2）

- 本講義の担当者は，計算力学が専門
  - 数値線形代数，特に実用問題向けの前処理付並列反復法の研究に長年従事しており，疎行列解法と関連したプログラミング技術の教育を実施してきた
- 並列計算機を使用した大規模シミュレーションの実施のためには，科学・工学と応用数理科学・計算機科学の専門家の密接な協力が必要
  - 応用数理科学・計算機科学の専門家もある程度アプリケーションに関する知識と経験が要求される
  - 本講義は，応用数理科学・計算機科学専攻の学生がアプリケーションに関する知識を効率的に得るのにも適している

学際計算科学･工学 人材育成プログラム（東京大学）

- 情報基盤センター，理学系研究科，情報理工学系研究科，工学系研究科，新領域創成科学研究科，生産技術研究所によって，全学的なHPC教育プログラムの整備が検討されている（平尾委員会→松本委員会）（2008.2.～）
- 地球惑星物理学科･地球惑星科学専攻における取り組みがモデルとなっている
  - 1990年代から世界的にも他に類を見ない充実した計算機･プログラミング教育が行なわれている
  - FY.2004～：並列プログラミング教育（21世紀COE）
- 平成21年度から順次実施

HPC（High-Performance Computing）の教育：背景

- 「T2Kオープンスパコン」，「次世代スーパーコンピュータ」等の開発を背景に，大規模並列シミュレーションへの期待は，産学において一層高まっている。

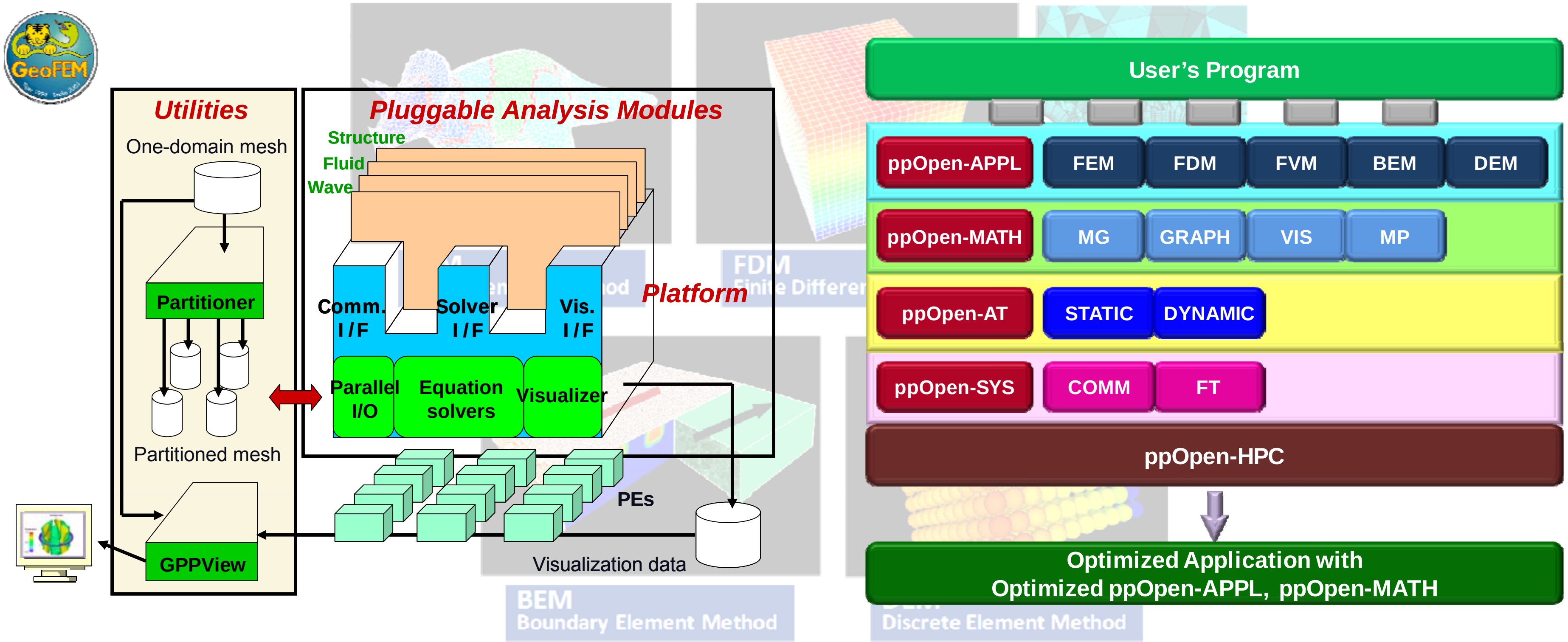
- 並列計算機を使いこなすためには，「並列プログラミング」の習得が必須である。
  - 並列計算機を使いこなす，アプリケーション分野の研究者，技術者の育成

当人材育成プログラムの特徴

- 環境整備が重要
  - 教育＋その後の研究支援
  - 単に数年の教育だけでなく，HPC技術を駆使した研究を生涯支援するための環境整備（＝開発基盤，協力体制）が必要
- 計算科学と計算機科学の融合，スパイラル効果による発展

人材育成のためには環境整備 教育＋その後の研究支援

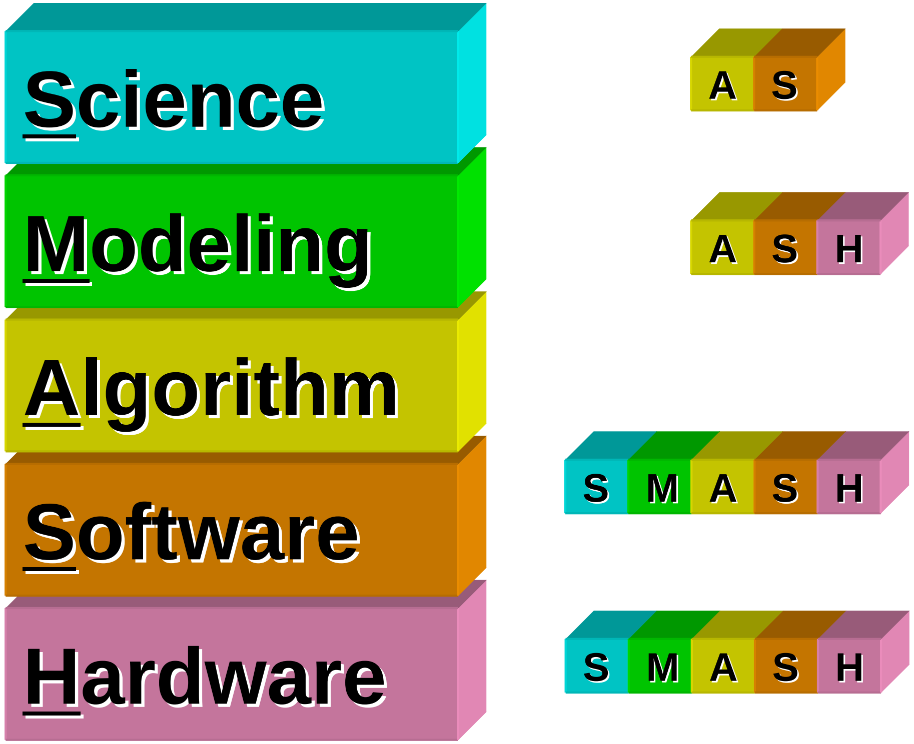
- HPC教育プログラムの整備：4S型人材育成戦略
- 大規模シミュレーションプログラム開発基盤の整備
  - ppOpen-HPC
- 並列シミュレーションコードの整備（オープンソース）



4S型人材育成戦略
「4つのS」: System, Stage, Status, Style

- **System**
  - SMASH
  - 科学技術計算の真髄
  - バランスが重要

- **Stage：4つの段階**
  - 並列プログラミングへの道
  - ③が最も重要，かつ教育困難
    - 現状：理論中心
  - ①，②：ガイドライン策定



① 計算機リテラシー
プログラミング言語

② 科学技術計算基礎論・演習
（数値解析・プログラミングの基礎）

ここに厚い壁

③ アプリケーションの実用的プログラミング（有限要素法等）

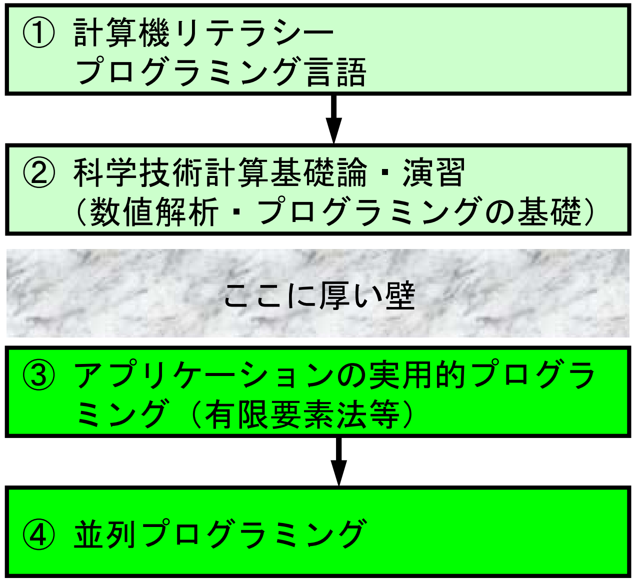
④ 並列プログラミング

4S型人材育成戦略（続き）「4つのS」：System，Stage, Status, Style

- **System**
  - SMASH
  - 科学技術計算の真髄
  - バランスが重要
- **Stage：4つの段階**
  - 並列プログラミングへの道
  - ③が最も重要，かつ教育困難
    - 現状：理論中心
  - ①，②：ガイドライン策定
- **Status：多様な人材**
  - スパコンアプリを動かせる人
  - スパコンアプリを作れる人
  - システムをいじれる人（HPCミドルウェア，新規ハードウェア）
- **Style：様々な形態**
  - 講義・演習，集中講義，（遠隔）講習会，e-Learning
  - 様々なバックグラウンドの受講者の多様なニーズに柔軟に対応
    - 大学院よりの進学者，社会人も
  - 受講者の負担を極力増やさない：コマ数をなるべく増やさない

教育の現状

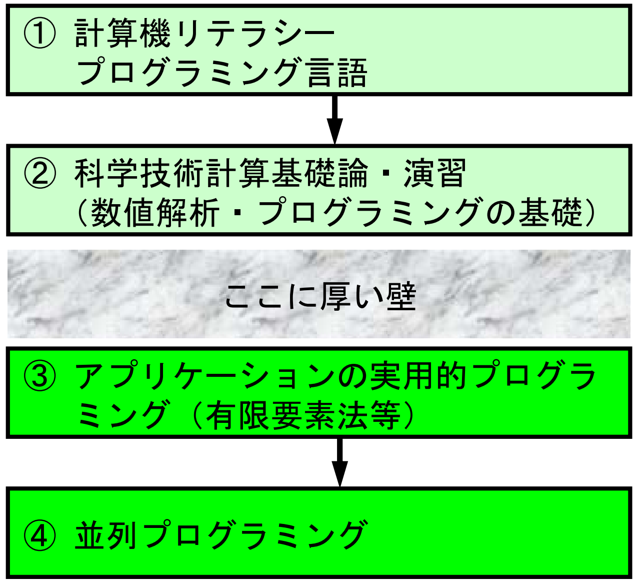
- ①，②は多くの学科で学部3年までに実施されている
- ③は理論中心
  - プログラミングの時間が割けない
- ④はごくわずか（③と折衷）
  - 奥田（工），片桐（工），中島（理）
  - 森下（新領域）：非数値系



- 実際にプログラムに触れるのは研究室配属後，アプリケーションプログラミングに関する系統的教育はほとんど行われていない
  - ①，②で学ぶことは③にはあまり役立たない（厚い壁）
- ③が重要，これをいかに教育するか

③の重要性

- アプリケーションの「並列化」
  - 元の手法・アルゴリズムを理解し，各アルゴリズムにおいて並列性を引き出す様々な工夫をすることが重要（例：並列分散データ構造）
  - 元のアプリケーションの中身（アルゴリズム，実装）がよくわかっていれば，「並列化」は難しくない



- プログラミング能力（SMA<u>S</u>H）をつけるために，徹底して実アプリケーションコードのソースを<u>「読む」</u>能力をつけるところに重点を置く（特に学部4年～大学院初級）
  - 英語，漢文の音読のごとく
  - これまでの経験で効果は確認済

背 景（2/2）

- 本講義の担当者は，計算力学が専門
  - 数値線形代数，特に実用問題向けの前処理付並列反復法の研究に長年従事しており，疎行列解法と関連したプログラミング技術の教育を実施してきた
- 並列計算機を使用した大規模シミュレーションの実施のためには，科学・工学と数理科学，計算機科学の専門家の密接な協力が必要
  - 数理科学，計算機科学の専門家もある程度アプリケーションに関する知識と経験が要求される
  - 本講義は，数理科学，計算機科学専攻の学生がアプリケーションに関する知識を効率的に得るのにも適している
- 本講義は「学際計算科学・工学 人材育成プログラム」の一環
  - ③に相当，冬学期講義が④に相当

本講義の歴史

- 2008年度：コンピュータ科学専攻
  - 冬学期：コンピュータ科学特別講義Ⅰ
    - 現在のⅠ，Ⅱを一学期にまとめた内容，FEM＋並列FEM
- 2009年度：コンピュータ科学専攻
  - 夏学期：コンピュータ科学特別講義Ⅰ
  - 冬学期：コンピュータ科学特別講義Ⅱ
- 2010年度：数理情報学専攻
  - 夏学期：科学技術計算Ⅰ
  - 冬学期：科学技術計算Ⅱ
- 2011年度：数理情報学・コンピュータ科学専攻
  - 夏学期：科学技術計算Ⅰ，コンピュータ科学特別講義Ⅰ
  - 冬学期：科学技術計算Ⅱ，コンピュータ科学特別講義Ⅱ

- 本講義の目的，背景等
- 有限要素法とは?
- 講義の予定，評価方針など

差分法と有限要素法

- 偏微分方程式の近似解法
  - 全領域を小領域（メッシュ，要素）に分割する
- 差分法
  - 微分係数を直接近似
    - Taylor展開

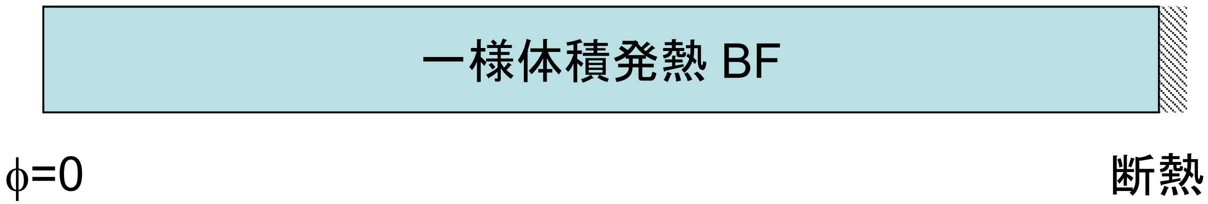
差分法

一次元熱伝導方程式(1/3)

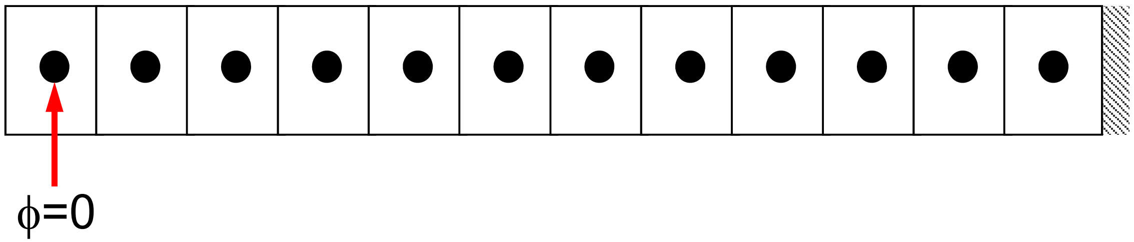
支配方程式:簡単のため熱伝導率=1

$$\frac{d^2\phi}{dx^2}+BF=0,\quad \phi=0@x=0,\ \frac{d\phi}{dx}=0@x=x_{\max}$$

$$\phi=-\frac{1}{2}BF\,x^2+BF\,x_{\max}\,x$$



実際は以下のような離散化をしているので注意が必要



断熱となっているのはこの面,しかし温度は計算されない

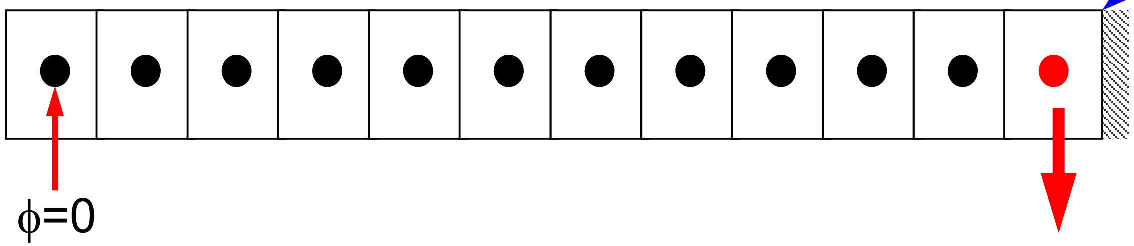
差分法

一次元熱伝導方程式(2/3)

解析解

$$\phi = -\frac{1}{2} BF\, x^2 + BF\, x_{max}\, x$$

断熱となっているのはこの面，しかし温度は計算されない（$X=X_{max}$）。



Δx=1.d0，メッシュ数=50，とすると，X_{max}=49.5，

●の点のX座標は49.0となる。BF=1.0d0とすると●での温度は：

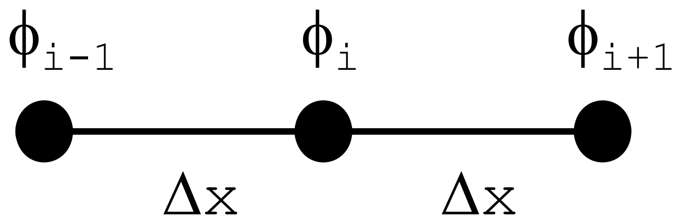
$$\phi = -\frac{1}{2} 49^2 + 49.5 \times 49 = -1200.5 + 985.05 = 1225$$

差分法

念のため・・・・差分について

- 差分法：Finite Difference Method
- マクロな微分
  - 微分係数を数値的に近似する手法

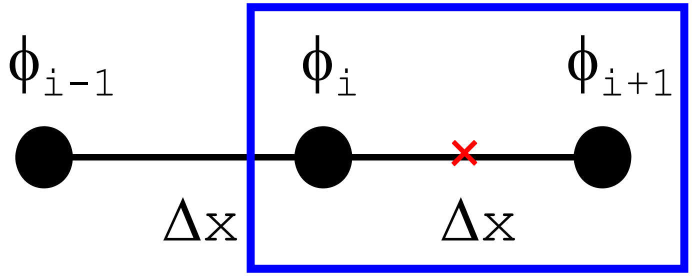
- 以下のような一次元系を考える



差分法

直感的な定義

- ×（iとi+1の中点）における微分係数



$$\left(\frac{d\phi}{dx}\right)_{i+1/2} \approx \frac{\phi_{i+1}-\phi_i}{\Delta x}$$

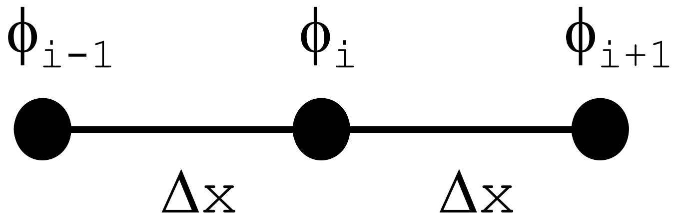
Δx→0となると微分係数の定義そのもの

- iにおける二階微分係数

$$\left(\frac{d^2\phi}{dx^2}\right)_i \approx \frac{\left(\frac{d\phi}{dx}\right)_{i+1/2}-\left(\frac{d\phi}{dx}\right)_{i-1/2}}{\Delta x} = \frac{\frac{\phi_{i+1}-\phi_i}{\Delta x}-\frac{\phi_i-\phi_{i-1}}{\Delta x}}{\Delta x} = \frac{\phi_{i+1}-2\phi_i+\phi_{i-1}}{\Delta x^2}$$

差分法

厳密な定義：Taylor展開（1/3）

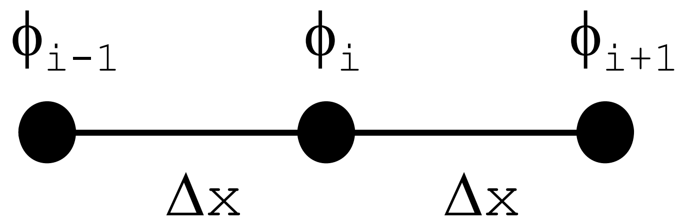


$$\phi_{i+1} = \phi_i + \Delta x \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_i + \frac{(\Delta x)^2}{2!} \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right)_i + \frac{(\Delta x)^3}{3!} \left(\frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3} \right)_i \cdots$$

$$\phi_{i-1} = \phi_i - \Delta x \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_i + \frac{(\Delta x)^2}{2!} \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right)_i - \frac{(\Delta x)^3}{3!} \left(\frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3} \right)_i \cdots$$

差分法

厳密な定義：Taylor展開（2/3）



前進差分

$$\phi_{i+1}=\phi_i+\Delta x\left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_i+\frac{(\Delta x)^2}{2!}\left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}\right)_i+\frac{(\Delta x)^3}{3!}\left(\frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3}\right)_i\cdots$$

$$\frac{\phi_{i+1}-\phi_i}{\Delta x}=\left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_i\underline{+\frac{(\Delta x)}{2!}\left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}\right)_i+\frac{(\Delta x)^2}{3!}\left(\frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3}\right)_i\cdots}$$

打ち切り誤差が
Δxのオーダー
（一次精度）

後退差分

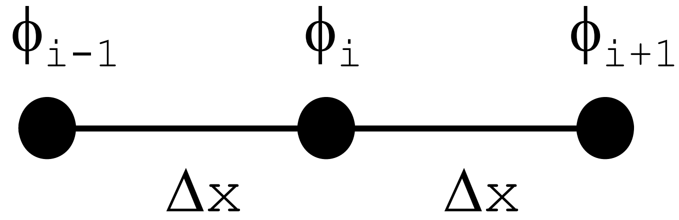
$$\phi_{i-1}=\phi_i-\Delta x\left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_i+\frac{(\Delta x)^2}{2!}\left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}\right)_i-\frac{(\Delta x)^3}{3!}\left(\frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3}\right)_i\cdots$$

$$\frac{\phi_i-\phi_{i-1}}{\Delta x}=\left(\frac{\partial \phi}{\partial x}\right)_i\underline{+\frac{(\Delta x)}{2!}\left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}\right)_i+\frac{(\Delta x)^2}{3!}\left(\frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3}\right)_i\cdots}$$

打ち切り誤差が
Δxのオーダー
（一次精度）

差分法

厳密な定義：Taylor展開（3/3）



中央差分，中心差分

$$\phi_{i+1} = \phi_i + \Delta x \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_i + \frac{(\Delta x)^2}{2!} \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right)_i + \frac{(\Delta x)^3}{3!} \left(\frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3} \right)_i \cdots$$

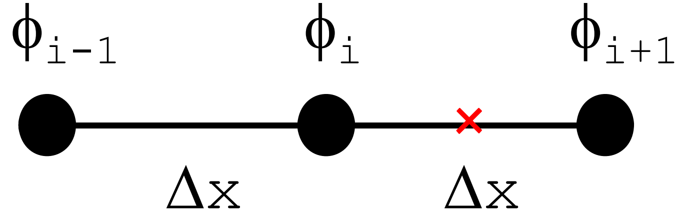
$$\phi_{i-1} = \phi_i - \Delta x \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_i + \frac{(\Delta x)^2}{2!} \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right)_i - \frac{(\Delta x)^3}{3!} \left(\frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3} \right)_i \cdots$$

$$\frac{\phi_{i+1} - \phi_{i-1}}{2\Delta x} = \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_i + \underline{\frac{2 \times (\Delta x)^2}{3!} \left(\frac{\partial^3 \phi}{\partial x^3} \right)_i} \cdots$$

打ち切り誤差が
$(\Delta x)^2$のオーダー
（二次精度）

差分法

直感的な定義：実は二次精度



$$\phi_{i+1} = \phi_{i+1/2} + \Delta x/2\left(\frac{\partial\phi}{\partial x}\right)_{i+1/2} + \frac{(\Delta x/2)^2}{2!}\left(\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}\right)_{i+1/2} + \frac{(\Delta x/2)^3}{3!}\left(\frac{\partial^3\phi}{\partial x^3}\right)_{i+1/2} \cdots$$

$$\phi_{i} = \phi_{i+1/2} - \Delta x/2\left(\frac{\partial\phi}{\partial x}\right)_{i+1/2} + \frac{(\Delta x/2)^2}{2!}\left(\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2}\right)_{i+1/2} - \frac{(\Delta x/2)^3}{3!}\left(\frac{\partial^3\phi}{\partial x^3}\right)_{i+1/2} \cdots$$

$$\frac{\phi_{i+1}-\phi_i}{\Delta x} = \left(\frac{\partial\phi}{\partial x}\right)_{i+1/2} + \underline{\frac{2\times(\Delta x/2)^2}{3!}\left(\frac{\partial^3\phi}{\partial x^3}\right)_{i+1/2} \cdots}$$

打ち切り誤差が
（Δx）^{2}のオーダー
（二次精度）

二点間の中点で二次精度，それ以外の点では一次精度・・・ということもできる。
Δxが均一でない場合も同様のことが起こる。

差分法

一次元熱伝導方程式（3/3）
要素単位の線形方程式

- 差分法による離散化

$$\left(\frac{d^2\phi}{dx^2}\right)_i \approx \frac{\left(\frac{d\phi}{dx}\right)_{i+1/2} - \left(\frac{d\phi}{dx}\right)_{i-1/2}}{\Delta x} = \frac{\frac{\phi_{i+1}-\phi_i}{\Delta x} - \frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{\Delta x}}{\Delta x} = \frac{\phi_{i+1} - 2\phi_i + \phi_{i-1}}{\Delta x^2}$$

- 各要素における線形方程式は以下のような形になる

$$\frac{d^2\phi}{dx^2} + BF = 0 \quad \longrightarrow$$

$$\frac{\phi_{i+1} - 2\phi_i + \phi_{i-1}}{\Delta x^2} + BF(i) = 0 \quad (1 \le i \le N)$$

$$\frac{1}{\Delta x^2}\phi_{i+1} - \frac{2}{\Delta x^2}\phi_i + \frac{1}{\Delta x^2}\phi_{i-1} + BF(i) = 0 \quad (1 \le i \le N)$$

$$A_L(i) \times \phi_{i-1} + A_D(i) \times \phi_i + A_R(i) \times \phi_{i+1} = BF(i) \quad (1 \le i \le N)$$

$$A_L(i) = \frac{1}{\Delta x^2},\ A_D(i) = -\frac{2}{\Delta x^2},\ A_R(i) = \frac{1}{\Delta x^2}$$

差分法と有限要素法

- 偏微分方程式の近似解法
  - 全領域を小領域（メッシュ，要素）に分割する
- 差分法
  - 微分係数を直接近似
    - Taylor展開
- 有限要素法
  - Finite Element Method（FEM）
  - 積分形式で定式化された「弱形式（weak form）」を解く
    - 微分方程式の解（古典解）に対して「弱解（weak solution）」
  - 重み付き残差法，変分法
  - 複雑形状への適用
    - 差分でもある程度の複雑形状は扱うことが可能

差分法で複雑形状を扱う例

Handbook of Grid Generation
座標変換

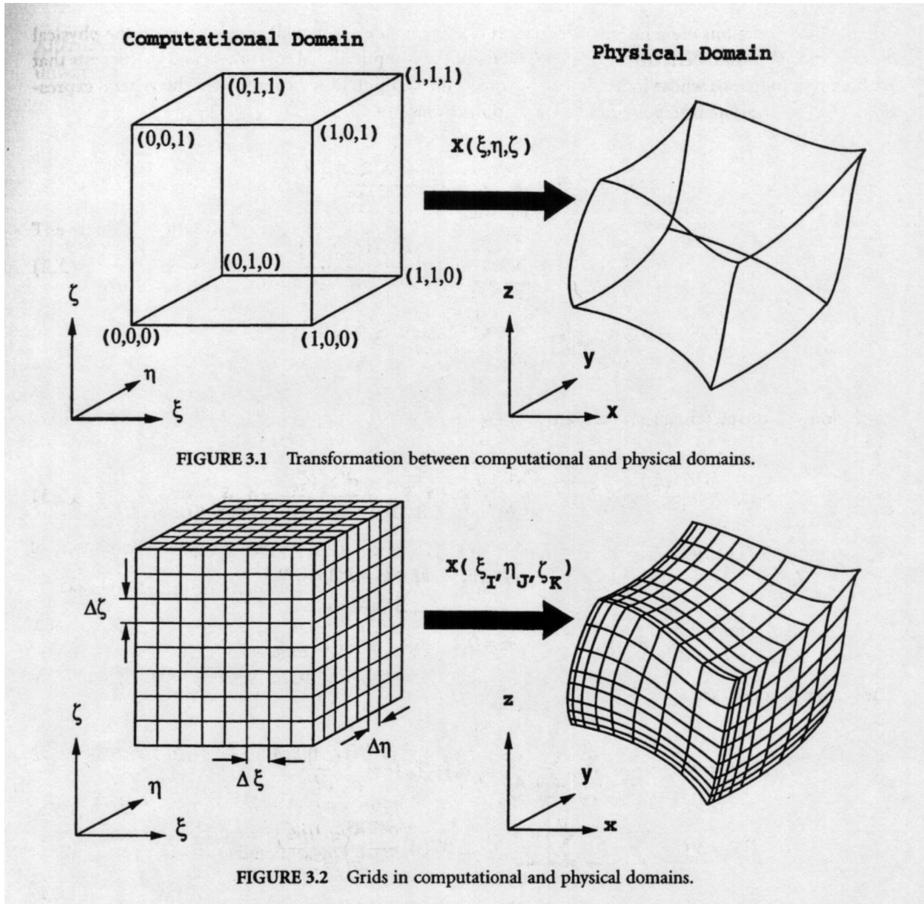
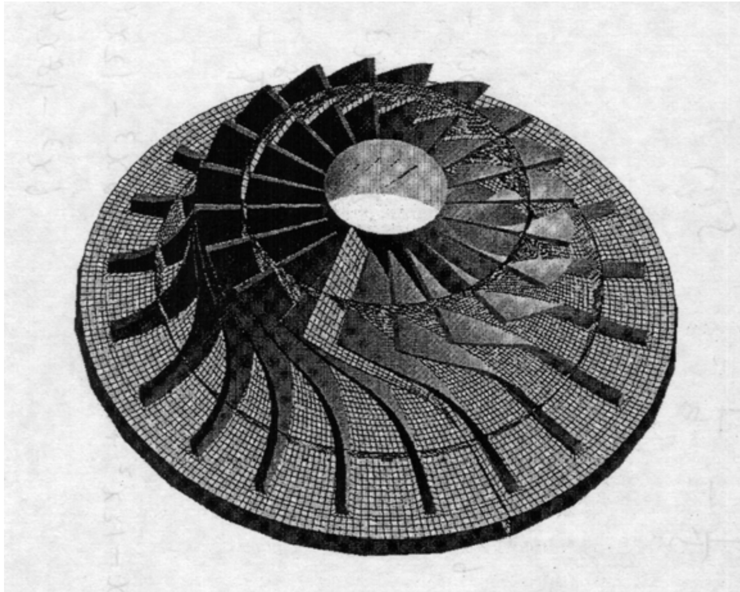


FIGURE 3.1 Transformation between computational and physical domains.

FIGURE 3.2 Grids in computational and physical domains.



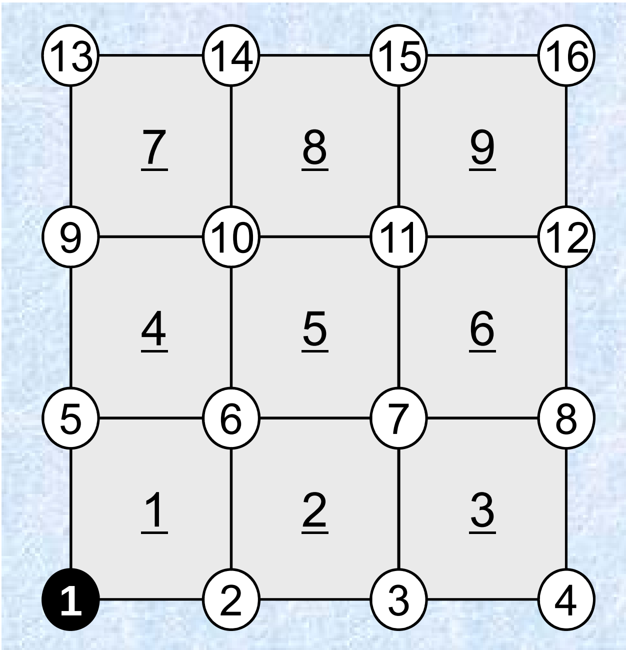
3分でわかる有限要素法

Finite-Element Method (FEM)

- 偏微分方程式の解法として広く知られている
  - elements (meshes，要素) & nodes (vertices，節点)
- 以下の二次元熱伝導問題を考える:

$$\lambda\left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 T}{\partial y^2}\right)+Q=0$$

  - 16節点，9要素（四角形）
  - 一様な熱伝導率 (λ=1)
  - 一様な体積発熱 (Q=1)
  - 節点1で温度固定：T=0
  - 周囲断熱



Galerkin FEM procedures

- 各要素にガラーキン法を適用:

$$\int_V [N]^T \left\{ \lambda \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right) + Q \right\} dV = 0$$

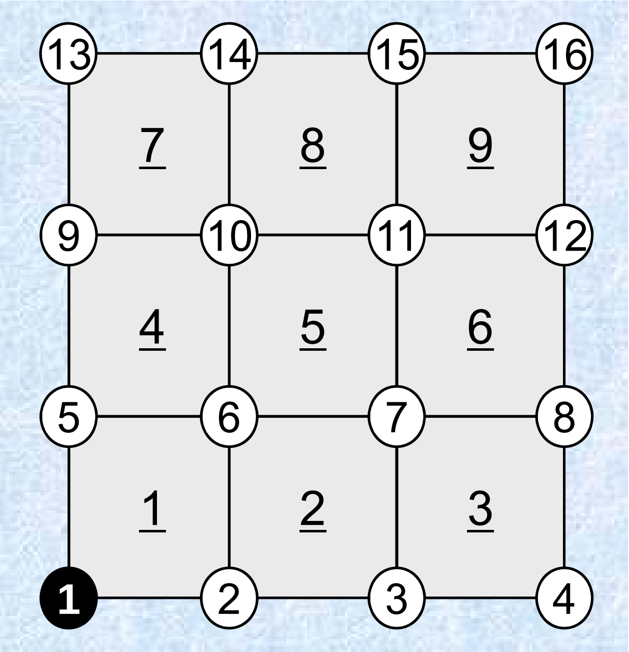
各要素で: $T = [N]\{\phi\}$

$[N]$: 形状関数(内挿関数)

- 偏微分方程式に対して，ガウス・グリーンの定理を適用し，以下の「弱形式」を導く

$$-\int_V \lambda \left(\frac{\partial [N]^T}{\partial x} \frac{\partial [N]}{\partial x} + \frac{\partial [N]^T}{\partial y} \frac{\partial [N]}{\partial y} \right) dV \cdot \{\phi\}$$

$$+ \int_V Q [N]^T dV = 0$$

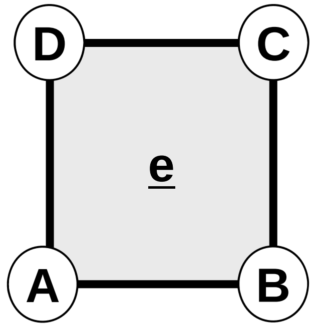


Element Matrix：要素マトリクス

- 各要素において積分を実行し，要素マトリクスを得る

$$
-\int_V \lambda\left(\frac{\partial[N]^T}{\partial x}\frac{\partial[N]}{\partial x}+\frac{\partial[N]^T}{\partial y}\frac{\partial[N]}{\partial y}\right)dV\cdot\{\phi\}
$$

$$
+\int_V Q[N]^T dV = 0
$$



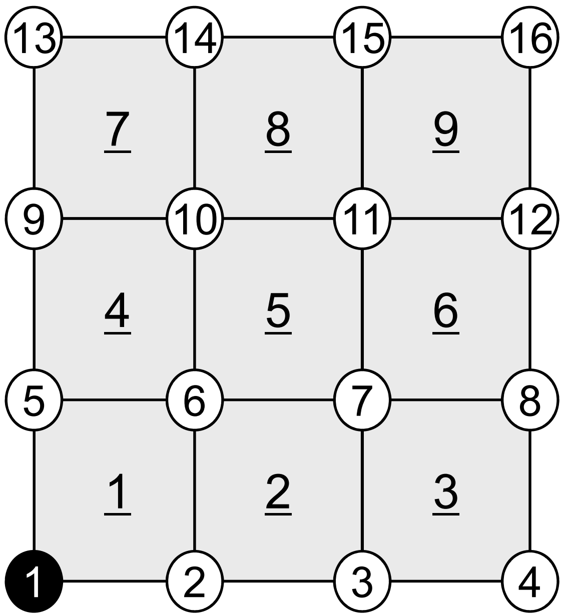
$$
[k^{(e)}]\{\phi^{(e)}\}=\{f^{(e)}\}
$$

$$
\begin{bmatrix}
k_{AA}^{(e)} & k_{AB}^{(e)} & k_{AC}^{(e)} & k_{AD}^{(e)} \\
k_{BA}^{(e)} & k_{BB}^{(e)} & k_{BC}^{(e)} & k_{BD}^{(e)} \\
k_{CA}^{(e)} & k_{CB}^{(e)} & k_{CC}^{(e)} & k_{CD}^{(e)} \\
k_{DA}^{(e)} & k_{DB}^{(e)} & k_{DC}^{(e)} & k_{DD}^{(e)}
\end{bmatrix}
\begin{Bmatrix}
\phi_A{}^{(e)} \\ \phi_B{}^{(e)} \\ \phi_C{}^{(e)} \\ \phi_D{}^{(e)}
\end{Bmatrix}
=
\begin{Bmatrix}
f_A{}^{(e)} \\ f_B{}^{(e)} \\ f_C{}^{(e)} \\ f_D{}^{(e)}
\end{Bmatrix}
$$

3分でわかる有限要素法

Global/overall Matrix：全体マトリクス

各要素マトリクスを全体マトリクスに足しこむ



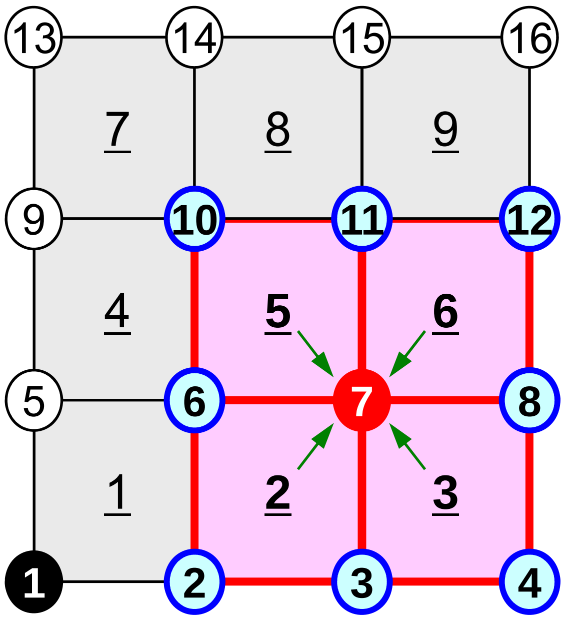
$$[K]\{\Phi\}=\{F\}$$

$$
\begin{bmatrix}
D & X & & & X & X & & & & & & & & & & \\
X & D & X & & X & X & X & & & & & & & & & \\
 & X & D & X & & X & X & X & & & & & & & & \\
 & & X & D & & & X & X & & & & & & & & \\
X & X & & & D & X & & & X & X & & & & & & \\
X & X & X & & X & D & X & & X & X & X & & & & & \\
 & X & X & X & & X & D & X & & X & X & X & & & & \\
 & & X & X & & & X & D & & & X & X & & & & \\
 & & & & X & X & & & D & X & & & X & X & & \\
 & & & & X & X & X & & X & D & X & & X & X & X & \\
 & & & & & X & X & X & & X & D & X & & X & X & X \\
 & & & & & & X & X & & & X & D & & & X & X \\
 & & & & & & & & X & X & & & D & X & & \\
 & & & & & & & & X & X & X & & X & D & X & \\
 & & & & & & & & & X & X & X & & X & D & X \\
 & & & & & & & & & & X & X & & & X & D
\end{bmatrix}
\begin{Bmatrix}
\Phi_1 \\ \Phi_2 \\ \Phi_3 \\ \Phi_4 \\ \Phi_5 \\ \Phi_6 \\ \Phi_7 \\ \Phi_8 \\ \Phi_9 \\ \Phi_{10} \\ \Phi_{11} \\ \Phi_{12} \\ \Phi_{13} \\ \Phi_{14} \\ \Phi_{15} \\ \Phi_{16}
\end{Bmatrix}
=
\begin{Bmatrix}
F_1 \\ F_2 \\ F_3 \\ F_4 \\ F_5 \\ F_6 \\ F_7 \\ F_8 \\ F_9 \\ F_{10} \\ F_{11} \\ F_{12} \\ F_{13} \\ F_{14} \\ F_{15} \\ F_{16}
\end{Bmatrix}
$$

3分でわかる有限要素法

Global/overall Matrix：全体マトリクス

各要素マトリクスを全体マトリクスに足しこむ



$$[K]\{\Phi\}=\{F\}$$

$$\begin{bmatrix}
D & X & & & X & X & & & & & & & & & & \\
X & D & X & & X & X & X & & & & & & & & & \\
& X & D & X & & X & X & X & & & & & & & & \\
& & X & D & & & X & X & & & & & & & & \\
X & X & & & D & X & & & X & X & & & & & & \\
X & X & X & & X & D & X & & X & X & X & & & & & \\
& X & X & X & & X & D & X & & X & X & X & & & & \\
& & X & X & & & X & D & & & X & X & & & & \\
& & & & X & X & & & D & X & & & X & X & & \\
& & & & X & X & X & & X & D & X & & X & X & X & \\
& & & & & X & X & X & & X & D & X & & X & X & X \\
& & & & & & X & X & & & X & D & & & X & X \\
& & & & & & & & X & X & & & D & X & & \\
& & & & & & & & X & X & X & & X & D & X & \\
& & & & & & & & & X & X & X & & X & D & X \\
& & & & & & & & & & X & X & & & X & D
\end{bmatrix}
\begin{Bmatrix}\Phi_1\\ \Phi_2\\ \Phi_3\\ \Phi_4\\ \Phi_5\\ \Phi_6\\ \Phi_7\\ \Phi_8\\ \Phi_9\\ \Phi_{10}\\ \Phi_{11}\\ \Phi_{12}\\ \Phi_{13}\\ \Phi_{14}\\ \Phi_{15}\\ \Phi_{16}\end{Bmatrix}
=
\begin{Bmatrix}F_1\\ F_2\\ F_3\\ F_4\\ F_5\\ F_6\\ F_7\\ F_8\\ F_9\\ F_{10}\\ F_{11}\\ F_{12}\\ F_{13}\\ F_{14}\\ F_{15}\\ F_{16}\end{Bmatrix}$$

3分でわかる有限要素法

得られた大規模連立一次方程式を解く

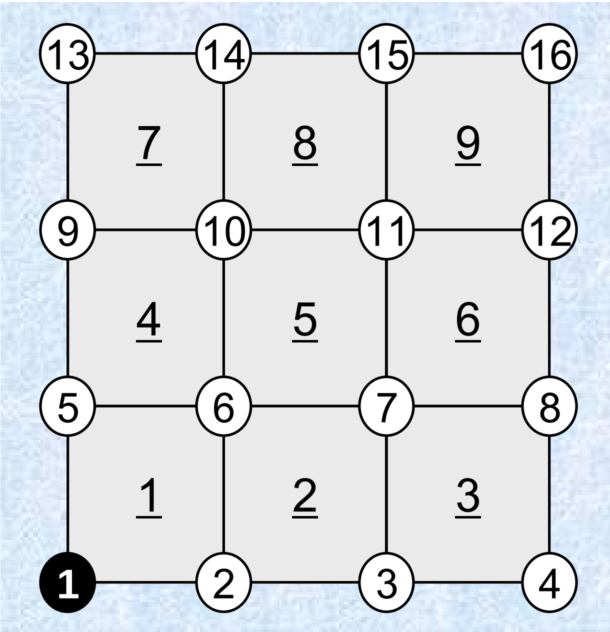
ある適切な境界条件 (ここではΦ_1=0)を適用

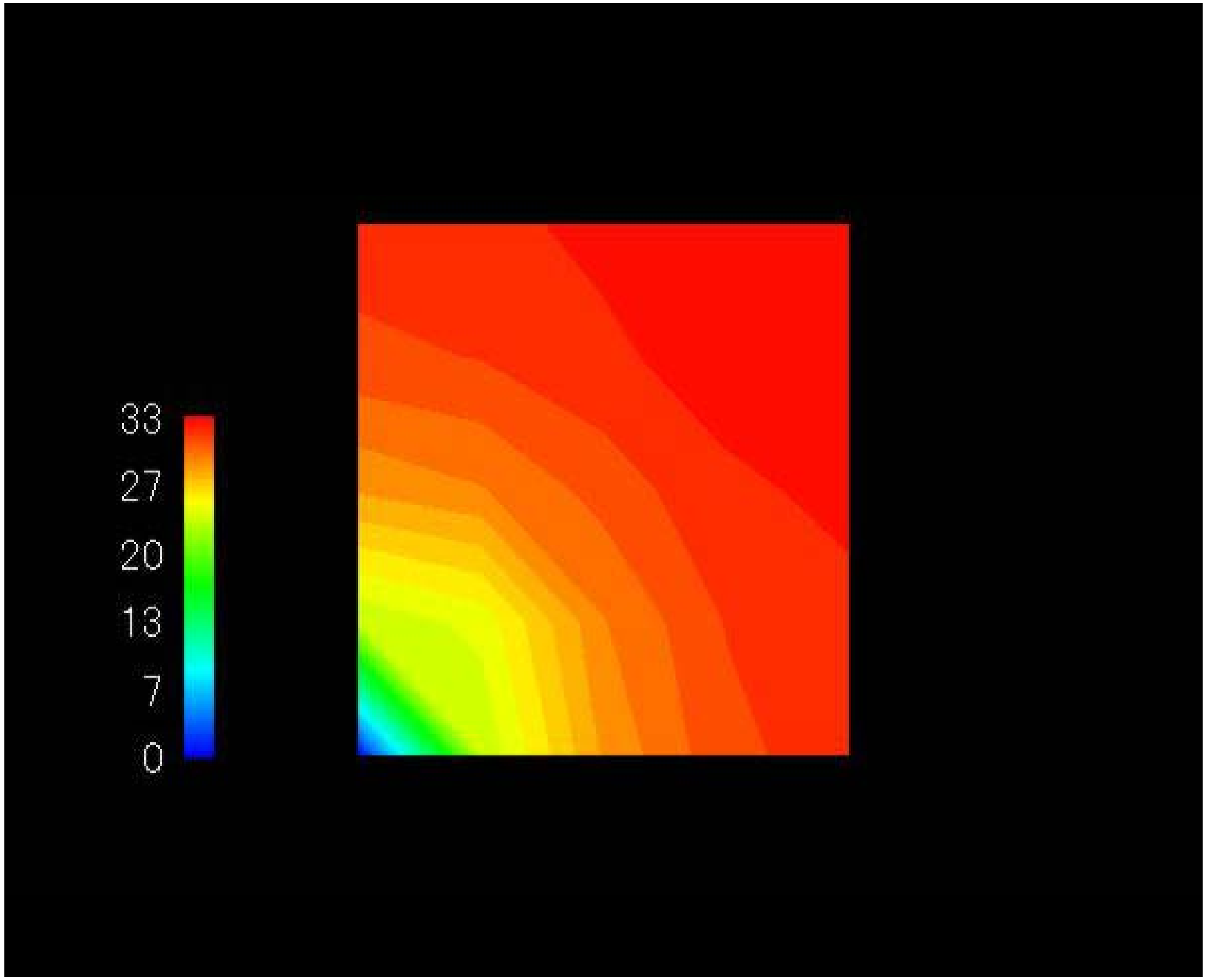
「疎（ゼロが多い）」な行列

$$
\begin{bmatrix}
D & X & & & X & X & & & & & & & & & & \\
X & D & X & & X & X & X & & & & & & & & & \\
& X & D & X & & X & X & X & & & & & & & & \\
& & X & D & & & X & X & & & & & & & & \\
X & X & & & D & X & & & X & X & & & & & & \\
X & X & X & & X & D & X & & X & X & X & & & & & \\
& X & X & X & & X & D & X & & X & X & X & & & & \\
& & X & X & & & X & D & & & X & X & & & & \\
& & & & X & X & & & D & X & & & X & X & & \\
& & & & X & X & X & & X & D & X & & X & X & X & \\
& & & & & X & X & X & & X & D & X & & X & X & X \\
& & & & & & X & X & & & X & D & & & X & X \\
& & & & & & & & X & X & & & D & X & & \\
& & & & & & & & X & X & X & & X & D & X & \\
& & & & & & & & & X & X & X & & X & D & X \\
& & & & & & & & & & X & X & & & X & D
\end{bmatrix}
\begin{Bmatrix}
\Phi_1 \\ \Phi_2 \\ \Phi_3 \\ \Phi_4 \\ \Phi_5 \\ \Phi_6 \\ \Phi_7 \\ \Phi_8 \\ \Phi_9 \\ \Phi_{10} \\ \Phi_{11} \\ \Phi_{12} \\ \Phi_{13} \\ \Phi_{14} \\ \Phi_{15} \\ \Phi_{16}
\end{Bmatrix}
=
\begin{Bmatrix}
F_1 \\ F_2 \\ F_3 \\ F_4 \\ F_5 \\ F_6 \\ F_7 \\ F_8 \\ F_9 \\ F_{10} \\ F_{11} \\ F_{12} \\ F_{13} \\ F_{14} \\ F_{15} \\ F_{16}
\end{Bmatrix}
$$

計算結果

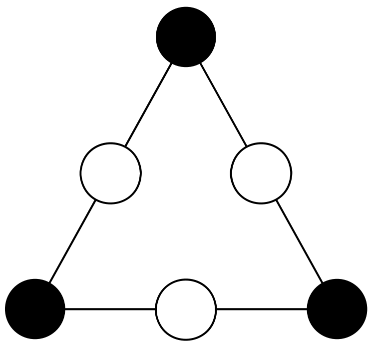
$$\lambda\left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 T}{\partial y^2}\right)+Q=0$$



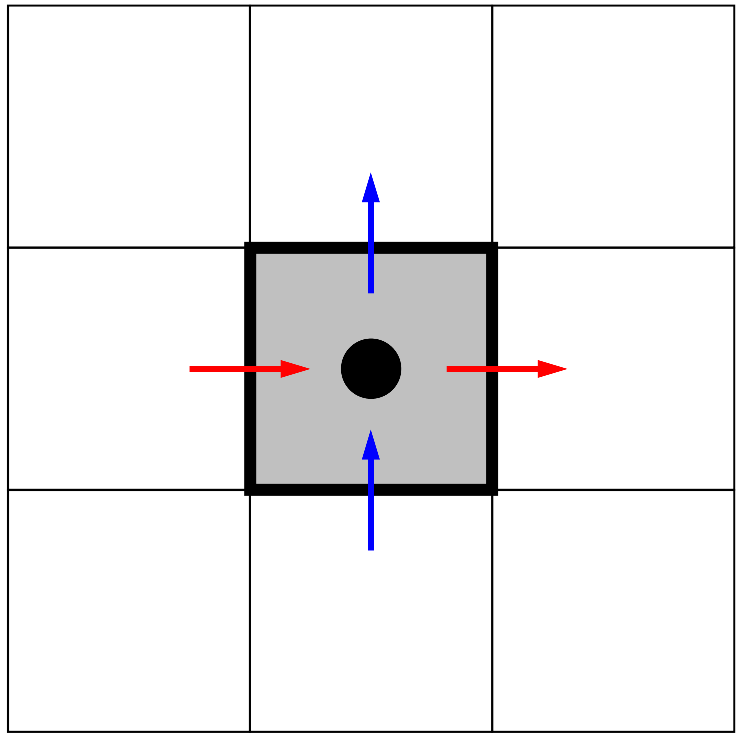


有限要素法の利点

- 要素内でのローカルな処理が中心となっている。
  - 特に高次要素，混合補間要素の定式化が容易
- 非圧縮性流体の場合



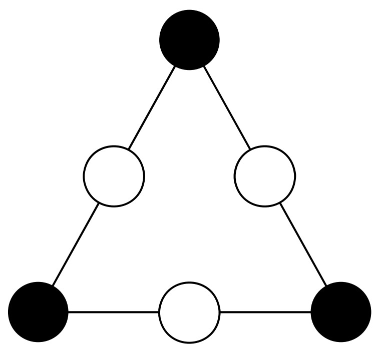
有限要素法
●:速度，圧力，○:速度



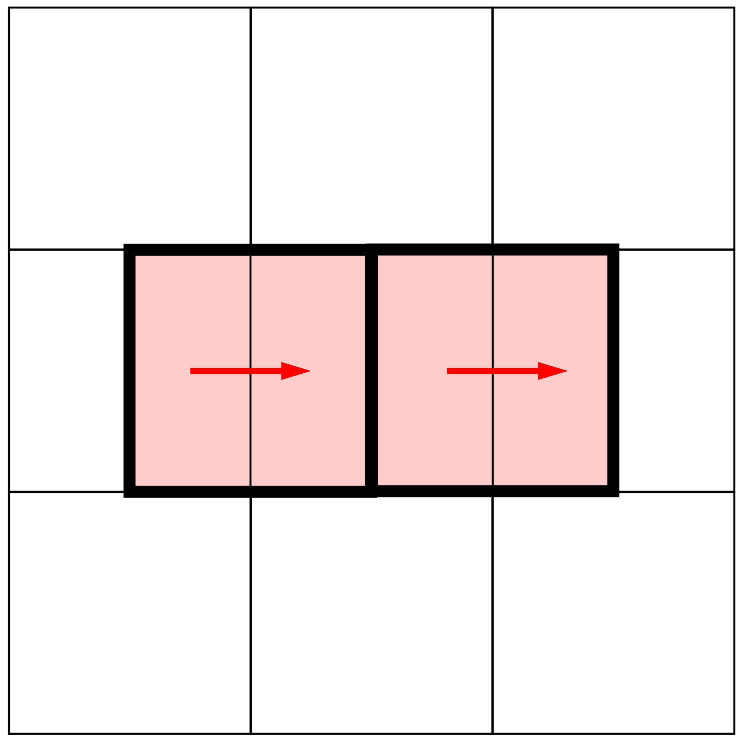
差分法:スタガード格子
圧力用のメッシュ

有限要素法の利点

- 要素内でのローカルな処理が中心となっている。
  - 特に高次要素，混合補間要素の定式化が容易
- 非圧縮性流体の場合



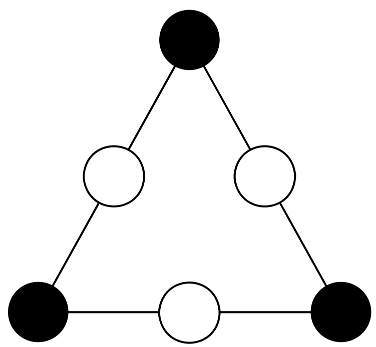
有限要素法
●：速度，圧力，○：速度



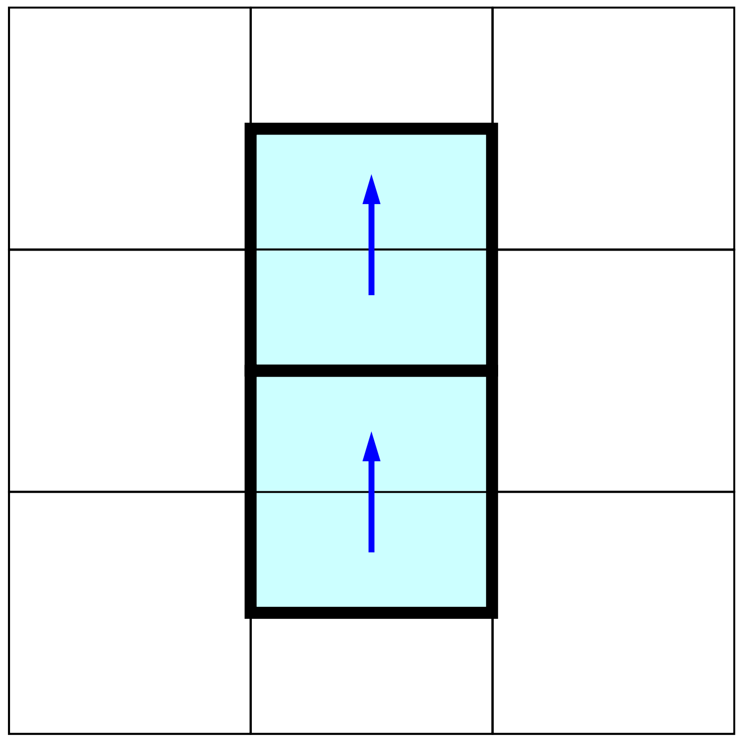
差分法：スタガード格子
X方向速度用のメッシュ

有限要素法の利点

- 要素内でのローカルな処理が中心となっている。
  - 特に高次要素，混合補間要素の定式化が容易
- 非圧縮性流体の場合



有限要素法
●：速度，圧力，〇：速度



差分法：スタガード格子
Y方向速度用のメッシュ

有限要素法の歴史

- 航空機の構造計算の手法として1950年代前半，ボーイング社，ワシントン大学（University of Washington）の研究者ら（M.J.Turner, H.C.Martin）によって提案
  - 後退翼：梁理論では対応できない
- 様々な分野への拡張
  - 非線形：T.J.Oden
  - 構造力学以外の分野：O.C.Zienkiewicz
- 商用パッケージ
  - NASTRAN
    - NASAによって開発された有限要素法による構造解析プログラム
    - 米国MSC社によって商用化
    - 製造業において広く使用されている
    - PC化により爆発的に普及

代表的な商用パッケージ

- MSC/NASTRAN
  - http://www.mscsoftware.co.jp/
- ANSYS
  - http://www.ansys.jp/

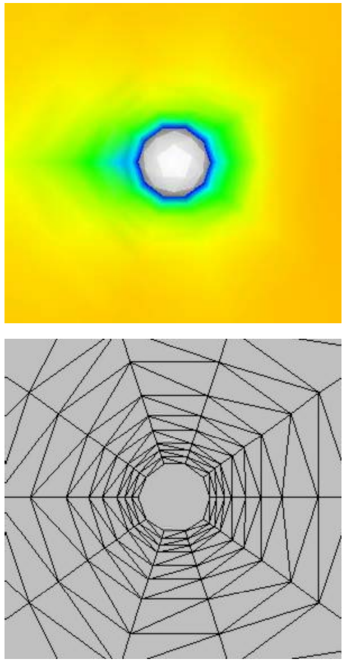
- 工学系の学科では，これらの商用コードを授業に導入し，それを使って弾性力学そのものを教えたりするような例もある。

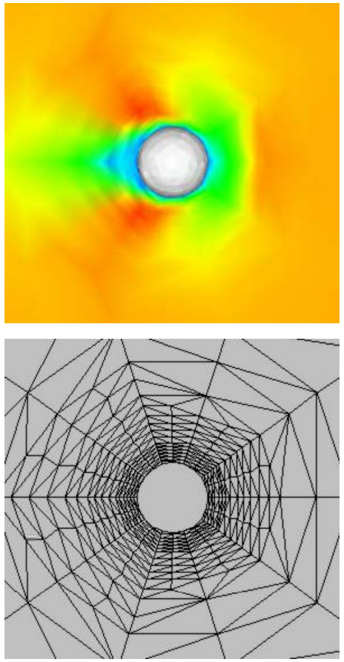
最近のトピックス

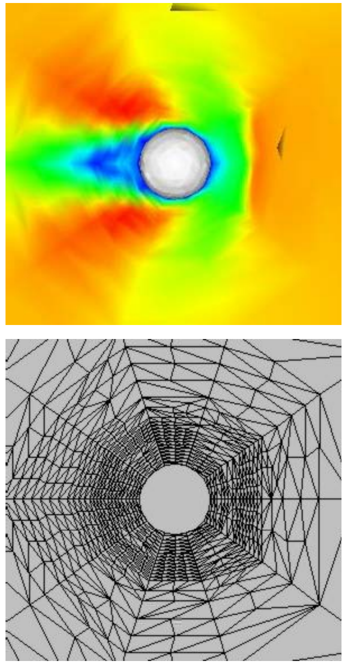
- 非線形分野への応用
  - 破壊・衝突
  - 接触
  - 材料非線形
- 並列計算
  - 商用コードにおいても並列版が登場しつつある
- 適応格子：Adaptive Mesh Refinement
  - 衝撃波，剥離
  - 応力集中
  - 並列計算時：動的負荷分散
- 格子生成
  - 特に大規模並列メッシュ生成

球周囲の超音速流れ

マッハ数=1.40，理想気体，一様流れ，
レイノルズ数（Re）=10^6

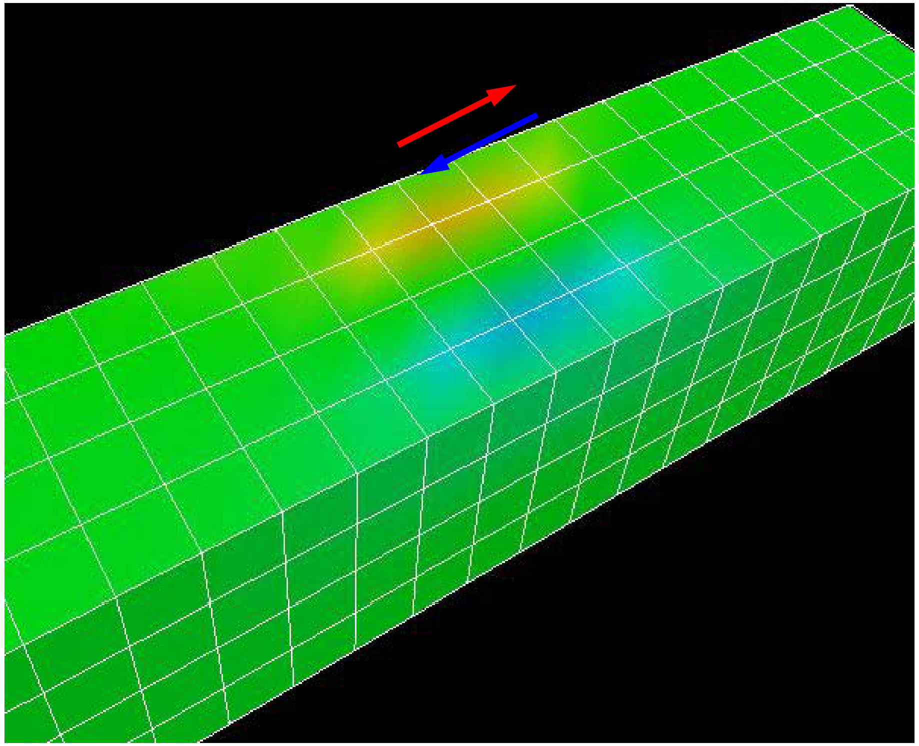


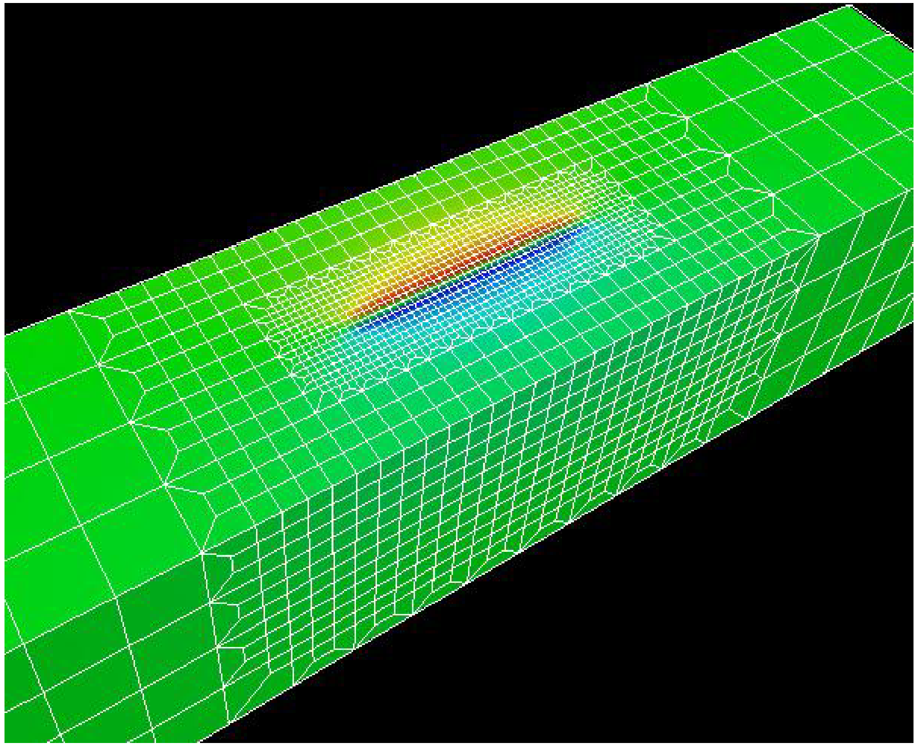




	Initial Grid		1-Lev. Adapted		2-Lev. Adapted	
	負荷分散（前後）		負荷分散（前後）		負荷分散（前後）	
PE0	137	-	793	652	3834	2527
PE1	137	-	696	650	2769	2526
PE2	136	-	668	652	2703	2522
PE3	136	-	448	651	1390	2524

三次元地殻変動シミュレーションへの適用例





movie

- 本講義の目的，背景等
- 有限要素法とは?
- 講義の予定，評価方針など

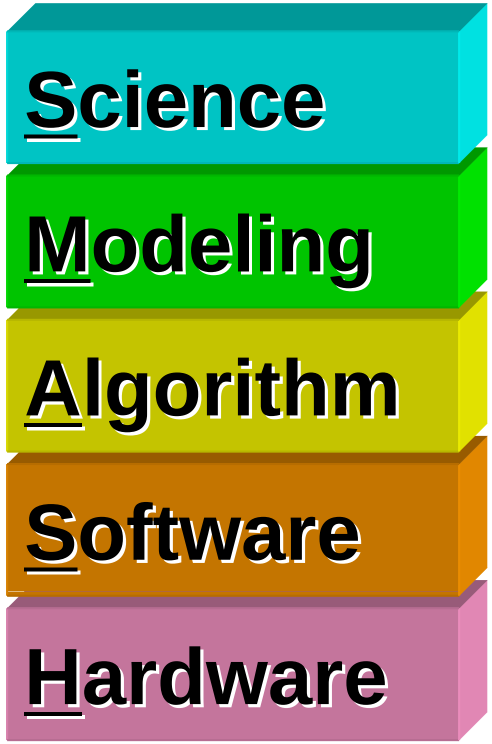
日付	番号	内容
4月10日（火）	CS-01	はじめに，有限要素法入門（Ⅰ）
4月17日（火）	CS-02	有限要素法入門（Ⅱ）
4月24日（火）	CS-03	弾性力学入門，一次元コード（Ⅰ）
5月01日（火）	（無し）	木曜講義の代替日
5月08日（火）	（休講）	中島海外出張
5月11日（金）	CS-04	一次元コード（Ⅱ）
5月15日（火）	CS-05	一次元コード（Ⅲ），線形ソルバー
5月22日（火）	CS-06	一次元コード（Ⅳ）
5月29日（火）	CS-07	一次元コード（Ⅴ），課題1出題
6月05日（火）	CS-08	三次元コード（Ⅰ）
6月12日（火）	CS-09	三次元コード（Ⅱ）
6月19日（火）	（休講）	中島海外出張
6月22日（金）	CS-10	三次元コード（Ⅲ）
6月26日（火）	（休講）	中島海外出張
6月29日（金）	CS-11	三次元コード（Ⅳ）
7月03日（火）	CS-12	三次元コード（Ⅴ），課題2出題
7月10日（火）	CS-13	課題1解説
7月17日（火）	（休講）	中島国内出張
7月24日（火）		（予備日）

受講条件，前提とする知識

- 大学教養程度の物理，数学の知識
  - 線形代数，解析学
- LU分解法，Gauss-Seidel法などの基礎的な数値解析アルゴリズムに関する知識
- CまたはFORTRANによるプログラミングの経験
- UNIX環境についての基本的な知識と利用経験
- 情報基盤センター教育用計算機システム（ECCS2012）のアカウントをあらかじめ取得のこと
  - http://www.ecc.u-tokyo.ac.jp/doc/announce/newuser.html

方 針（1/2）

- 弾性力学（固体力学）を題材とする
  - 有限要素法の本来の目的
- SMASH
  - SMASHが中心であるが，Scienceについても少々教える
- 有限要素法は二次元，三次元問題に適用してこそ意味がある
  - とにかく三次元問題まで理解してもらうことを主眼とする
  - 日程的にはかなり厳しくなることを覚悟しておいてください



方 針（2/2）

- 本来，自分でプログラムを作ってこそ身に付くものであるがそれは中々難しい
  - 「読む」ことを基本
  - FORTRAN，Cの両方を準備
    - 解説は主としてCで実施するが，基本的な原理の説明なので余り問題は無い（と思う）

- 講義資料
  - 月曜朝0900までにWEBにて公開（配布はしない：今日は特別）
- 08:40開始
  - 建物は08:00から入れる
- 前列から座る，端末は（終了後）シャットダウン

評 価

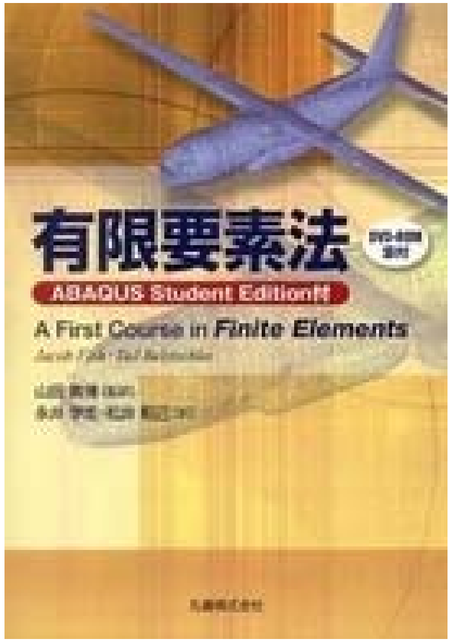
- 出席（10%以下）
- 宿題
  - 随時
  - 原則として翌週解説

- レポート（90%以上）
  - 2題程度
  - プログラムの改良が中心

参考文献（1/2）

- 菊地「有限要素法概説（新訂版）」，サイエンス社，1999.
- 竹内，樫山，寺田（日本計算工学会編）「計算力学：有限要素法の基礎」，森北出版，2003.
- 登坂，大西「偏微分方程式の数値シミュレーション第2版」，東大出版会，2003.
  - 差分法，境界要素法との比較
- 福森「よくわかる有限要素法」，オーム社，2005.
  - ヘルムホルツ方程式
- 矢川，宮崎「有限要素法による熱応力・クリープ・熱伝導解析」，サイエンス社，1985.　（品切）
- Segerlind, L.（川井監訳）「応用有限要素解析 第2版」，丸善，1992.（品切）

参考文献（2/2）



- Fish, Belytschko（山田，永井，松井訳）「有限要素法」，丸善，2008.
  - 原著「A First Course in Finite Elements 」
  - ABAQUS Student Editionが附属

参考文献（より進んだ読者向け）

- 菊池，岡部「有限要素システム入門」，日科技連，1986.
- 山田「高性能有限要素法」，丸善，2007.
- 奥田，中島「並列有限要素法」，培風館，2004.

- Smith, I. 他「Programming the Finite Element Method (4th edition)」，Wiley.

その他

- 連絡事項等は随時WEBに掲載
- 日本語，英語・・・
- 講義資料，宿題正解
  - http://nkl.cc.u-tokyo.ac.jp/12s/

科学技術計算（有限要素法プログラミング） I, II

- 対象者
  - 大学院
- 開講時期＆単位数
- 履修条件
  - IIを履修する者は：
    - Iを履修していなければならない（または同等以上の知識と経験）
- 概要
  - Iでは，科学技術シミュレーションで広く使用されている有限要素法の基礎的な理論から実用的なプログラムの作成法まで，連立一次方程式解法等周辺技術も含めて講義を実施し，プログラミングの実習を行う。
  - IIでは，並列有限要素法のためのデータ構造，並列プログラムの作成法，「HPC-MW」等の大規模並列シミュレーションコード開発基盤についても講義し，T2Kオープンスパコンによるプログラミング実習を実施する。
  - 大規模並列シミュレーションにおいては，科学・工学と計算機科学の専門家の密接な協力が必要である。本講義は，単に並列アプリケーション開発技術を習得するだけでなく，特にコンピュータ科学専攻の学生がアプリーケーション側のニーズを把握し，両分野の融合領域を開拓する問題意識を育てることを目的としている。
  - I, IIとも課題のレポート採点で成績をつける

<u>夏学期（I）：2単位⇒③</u>

1. 概要
2. 有限要素法の基礎理論
3. ガラーキン法による有限要素法の実装
4. 疎行列解法，前処理手法
5. 有限要素法プログラミング解説
   - 一次元問題
   - 三次元問題
6. プログラミング実習（情報基盤センターECCS2008システムを使用）

<u>冬学期（II）：2単位⇒④</u>

1. 概要
2. 並列計算プログラミング入門
3. 並列有限要素法のデータ構造
4. 並列有限要素法プログラムの開発
5. 大規模並列シミュレーションコード開発基盤
6. プログラミング実習（T2Kオープンスパコンを使用）