

有限要素法による
一次元定常熱伝導解析プログラム
Fortran編

中島 研吾

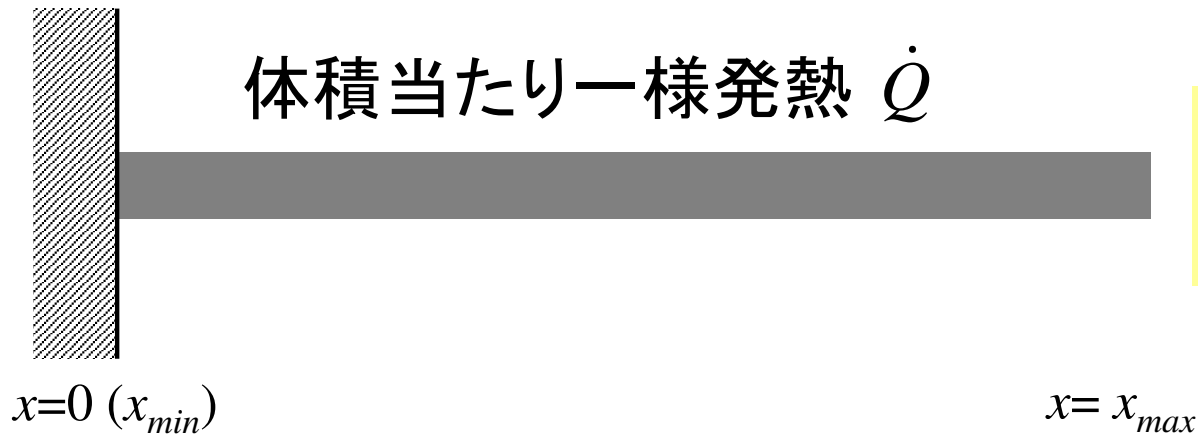
東京大学情報基盤センター

- ガラーキン法による一次元熱伝導問題の解法
- 連立一次方程式の解法
 - 共役勾配法
 - 前処理手法
- 疎行列格納法
- プログラムの内容

キーワード

- 一次元熱伝導問題
- ガラーキン法
- 線形一次要素
- 前処理付共役勾配法

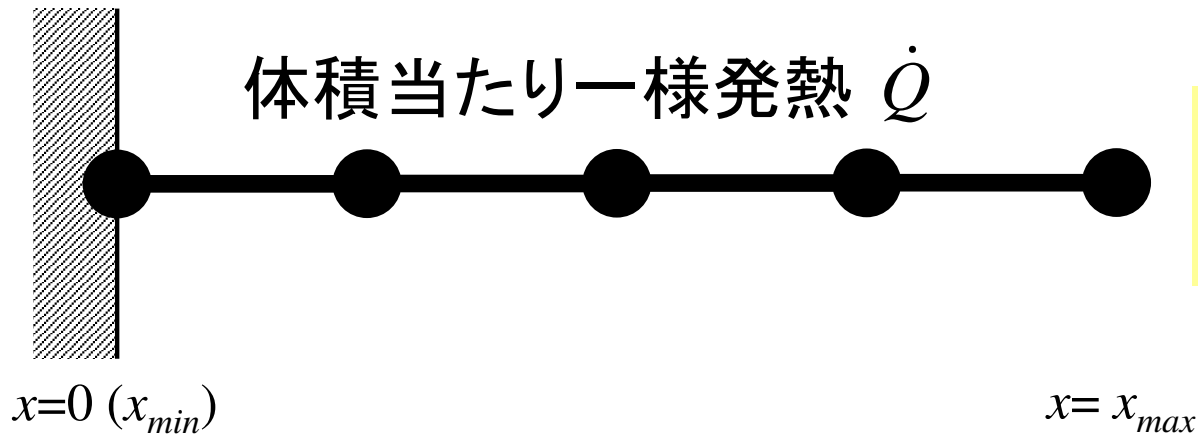
対象とする問題：一次元熱伝導問題



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

- 一様な：断面積 A ，熱伝導率 λ
- 体積当たり一様発熱（時間当たり） $[QL^{-3}T^{-1}]$ \dot{Q}
- 境界条件
 - $x=0$: $T=0$ （固定）
 - $x=x_{max}$: $\frac{\partial T}{\partial x} = 0$ （断熱）

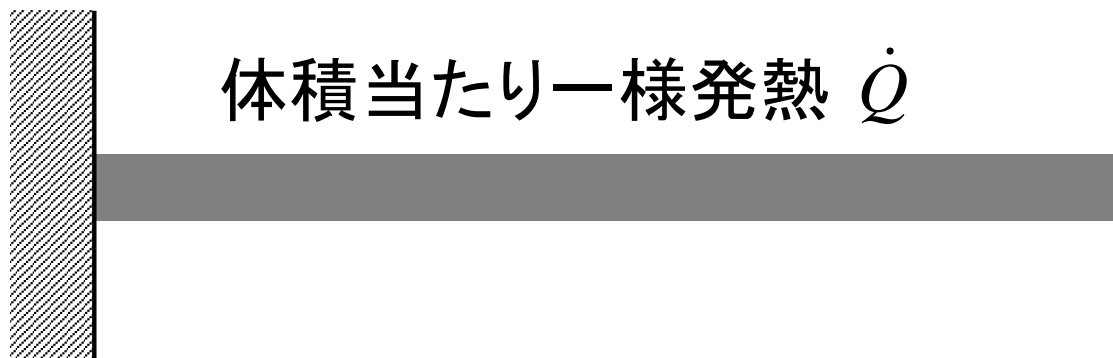
対象とする問題：一次元熱伝導問題



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

- 一様な：断面積 A ，熱伝導率 λ
- 体積当たり一様発熱（時間当たり） $[QL^{-3}T^{-1}]$ \dot{Q}
- 境界条件
 - $x=0$: $T=0$ （固定）
 - $x=x_{max}$: $\frac{\partial T}{\partial x} = 0$ （断熱）

解析解



体積当たり一様発熱 \dot{Q}

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

$x=0$ (x_{min})

$$T = 0 @ x = 0$$

$x = x_{max}$

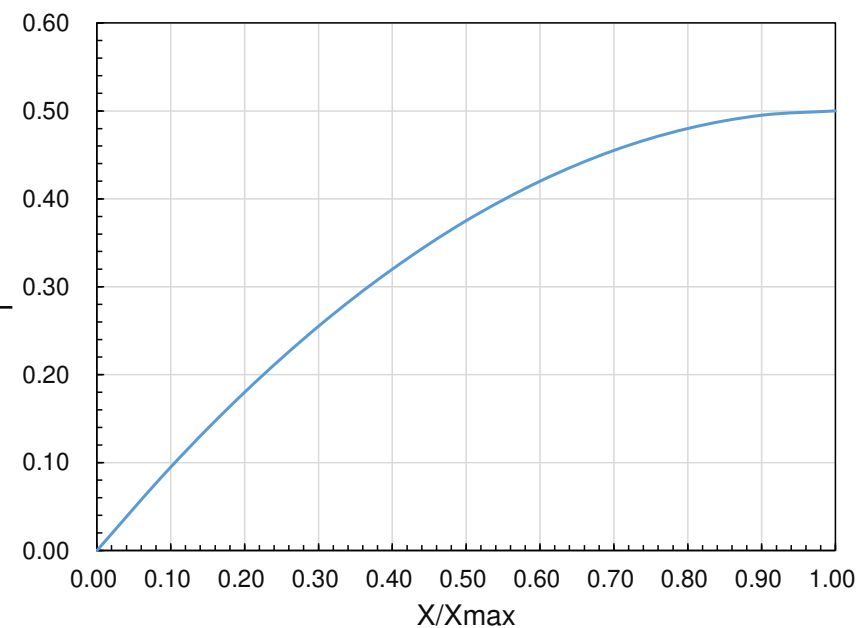
$$\frac{\partial T}{\partial x} = 0 @ x = x_{max}$$

$$\lambda T'' = -\dot{Q}$$

$$\lambda T' = -\dot{Q}x + C_1 \Rightarrow C_1 = \dot{Q}x_{max}, \quad T' = 0 @ x = x_{max}$$

$$\lambda T = -\frac{1}{2}\dot{Q}x^2 + C_1x + C_2 \Rightarrow C_2 = 0, \quad T = 0 @ x = 0$$

$$\therefore T = -\frac{1}{2\lambda}\dot{Q}x^2 + \frac{\dot{Q}x_{max}}{\lambda}x$$



一次元線形要素 (1/4)

- 一次元線形要素

- 長さ L の両端に節点 (node) を持つ線分

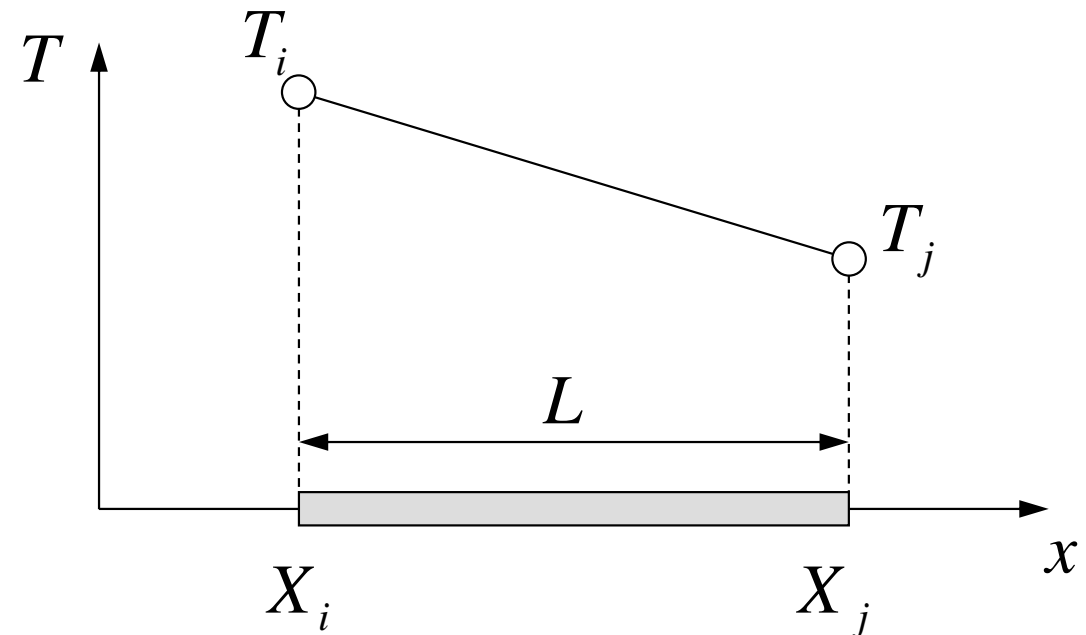
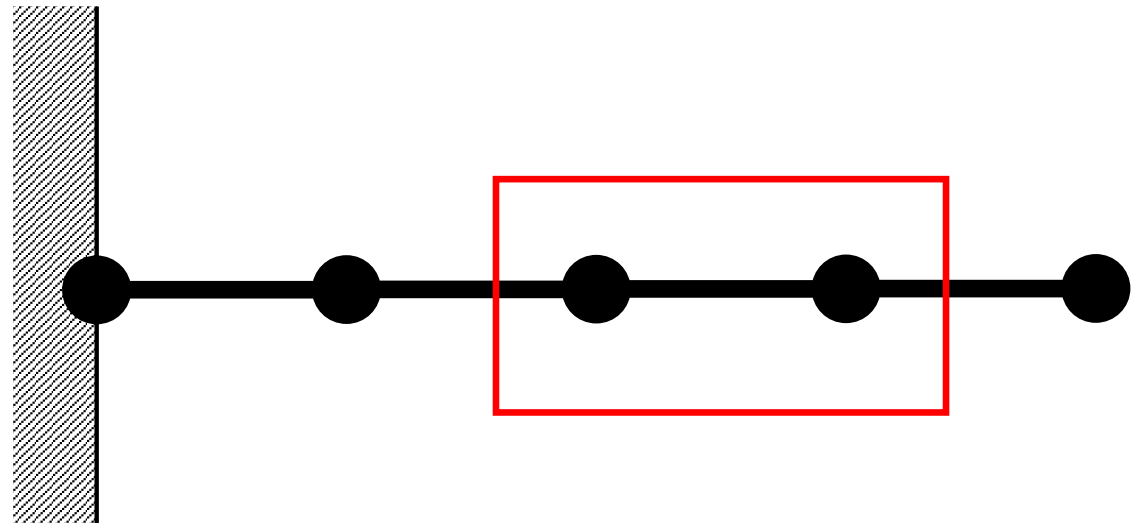
- 節点 : node

- 要素 : element

- 節点 i, j における温度を T_i, T_j

- 要素内での温度 T は以下のように表される (座標 x の一次関数, Piecewise Linear) :

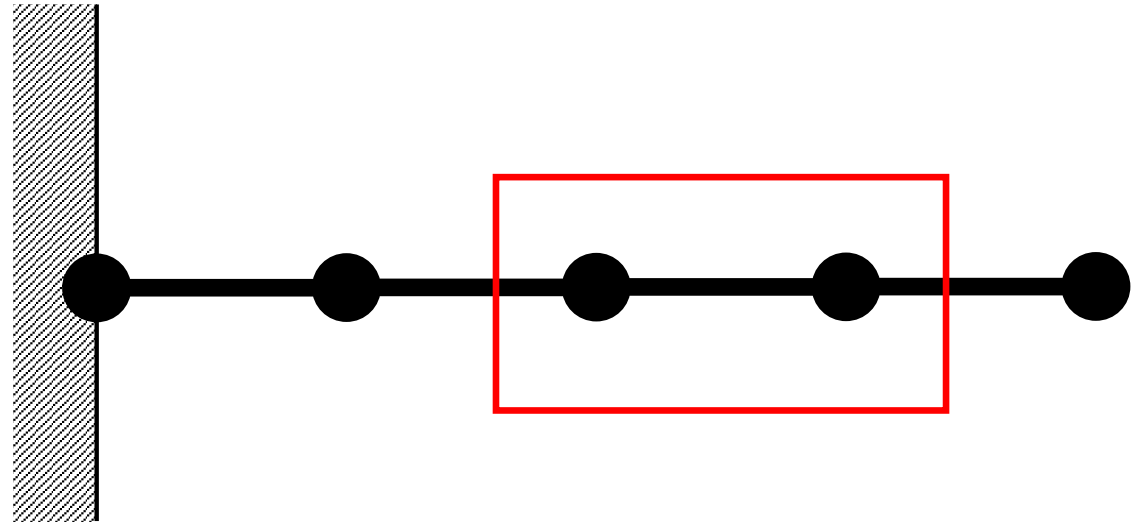
$$T = \alpha_1 + \alpha_2 x$$



一次元線形要素 (1/4)

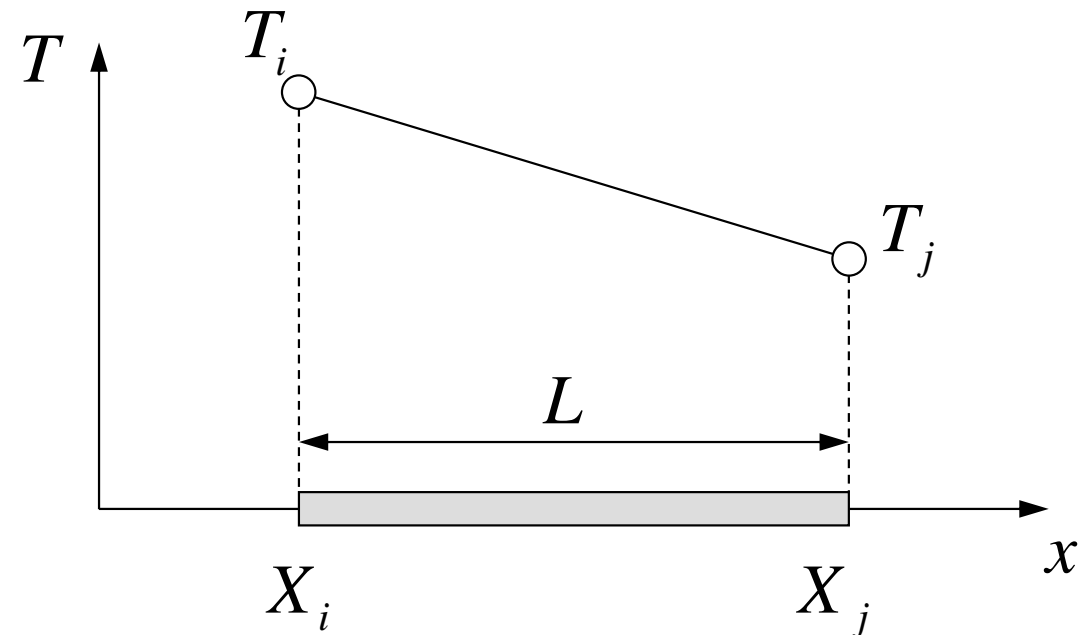
- **一次元線形要素**

- 長さ L の両端に節点 (node) を持つ線分
 - 節点 : node
 - 要素 : element



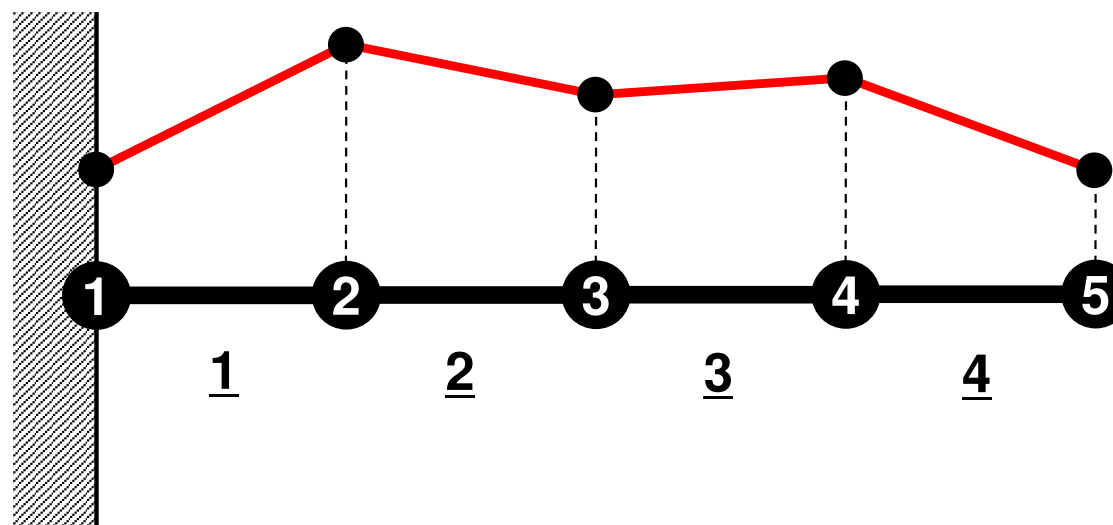
- 節点 i, j における温度を T_i, T_j
- 要素内での温度 T は以下のように表される (座標 x の一次関数, Piecewise Linear) :

$$T = \alpha_1 + \alpha_2 x$$

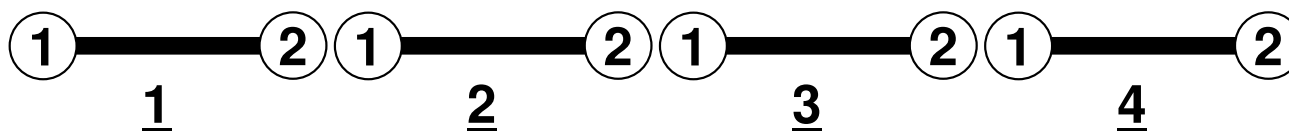


Piecewise Linear

各要素内で「温度 T の分布」が線形



要素番号
節点番号(全体)



各要素における
「局所」節点番号

温度勾配は要素内で一定
(節点で不連続となる可能性あり)

一次元線形要素：形状関数 (2/4)

- 節点での条件から，係数は以下のように求められる：

$$T = T_i @ x = X_i, \quad T = T_j @ x = X_j$$

$$T_i = \alpha_1 + \alpha_2 X_i, \quad T_j = \alpha_1 + \alpha_2 X_j$$

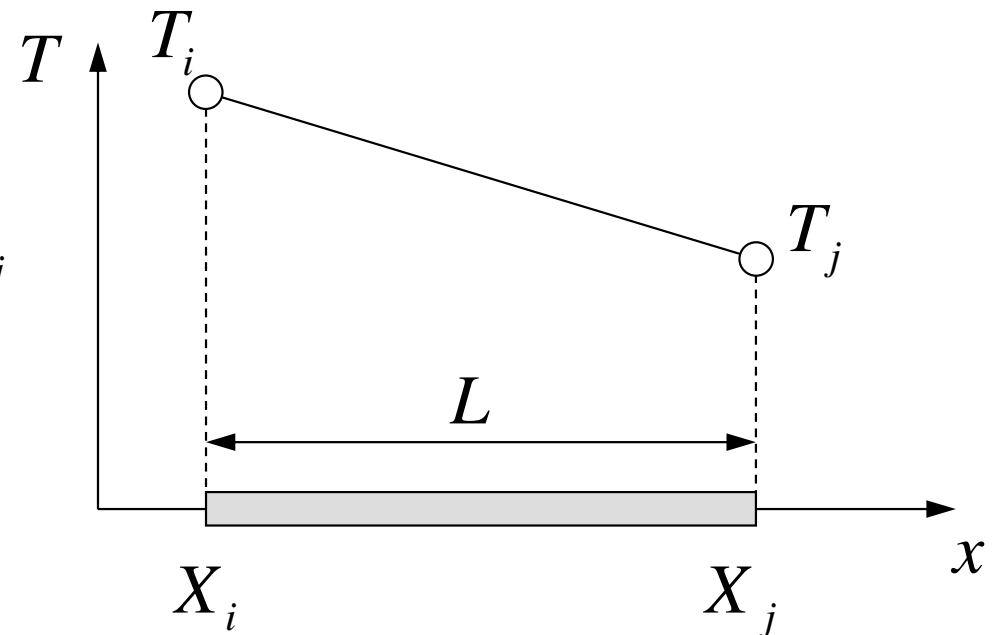
- 従って：

$$\alpha_1 = \frac{T_i X_j - T_j X_i}{L}, \quad \alpha_2 = \frac{T_j - T_i}{L}$$

- 元の式に代入して，書き直すと以下のようなになる

$$T = \underbrace{\left(\frac{X_j - x}{L} \right)}_{N_i} T_i + \underbrace{\left(\frac{x - X_i}{L} \right)}_{N_j} T_j$$

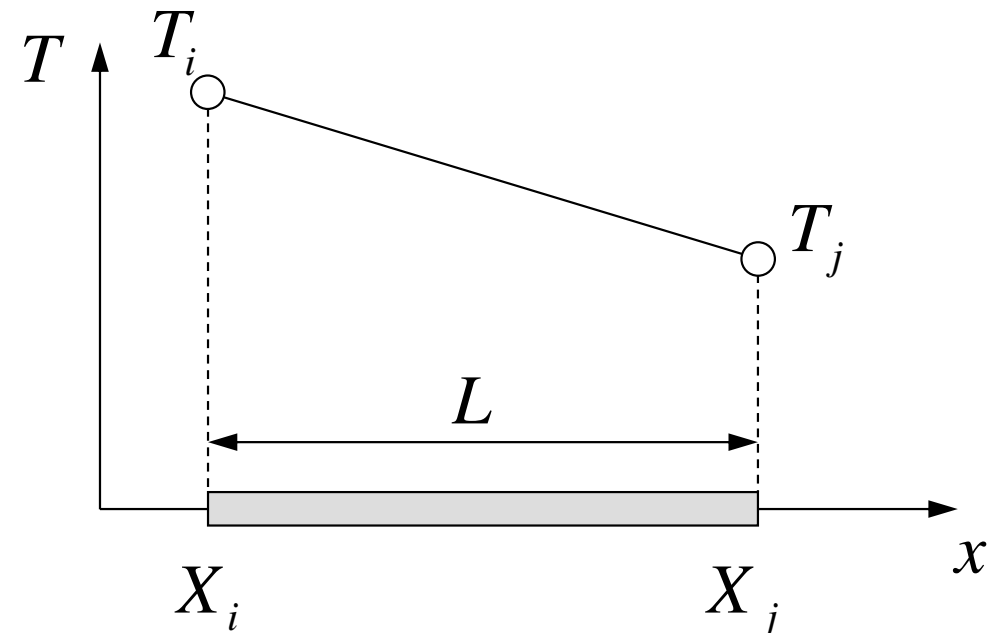
これらのxに関する一次式を形状関数 (shape function) または内挿関数 (interpolation function) と呼ぶ (N_i , N_j と表す)



一次元線形要素：形状関数（3/4）

- 形状関数 N_k は要素を構成する節点数と同じ数だけ存在する：
 - 位置座標のみの関数である
 - 「試行関数」の一種

$$N_i = \left(\frac{X_j - x}{L} \right), \quad N_j = \left(\frac{x - X_i}{L} \right)$$



- 形状関数の一次結合により要素内の温度を表す
 - 係数（=未知数）が節点における温度

$$T = N_i T_i + N_j T_j \longleftrightarrow$$

$$T_M = \sum_{i=1}^M a_i \Psi_i$$

Ψ_i 領域, 境界において定義される, 位置座標のみ既知関数, 互いに独立である: 試行関数 (trial/test function) と呼ばれる。線形代数における基底 (basis) に相当する

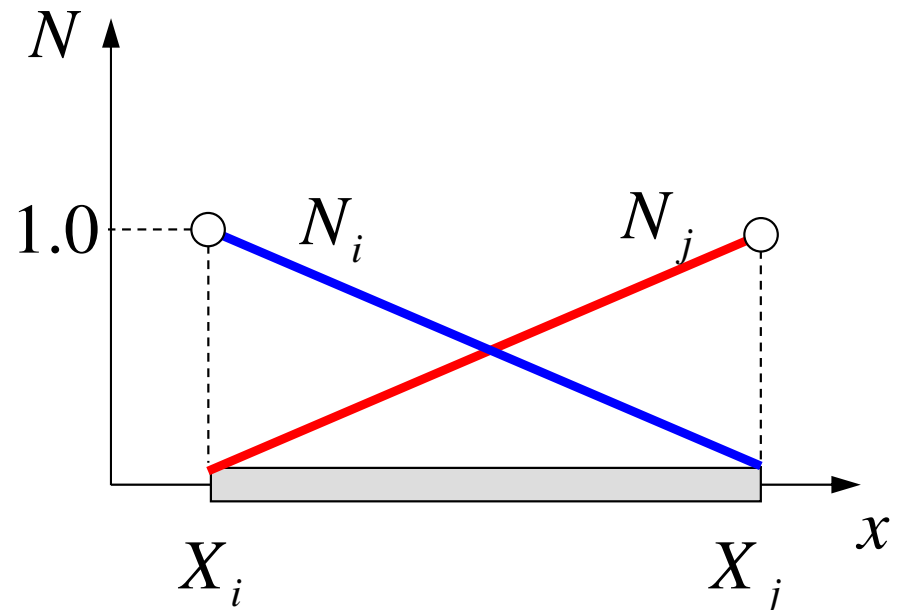
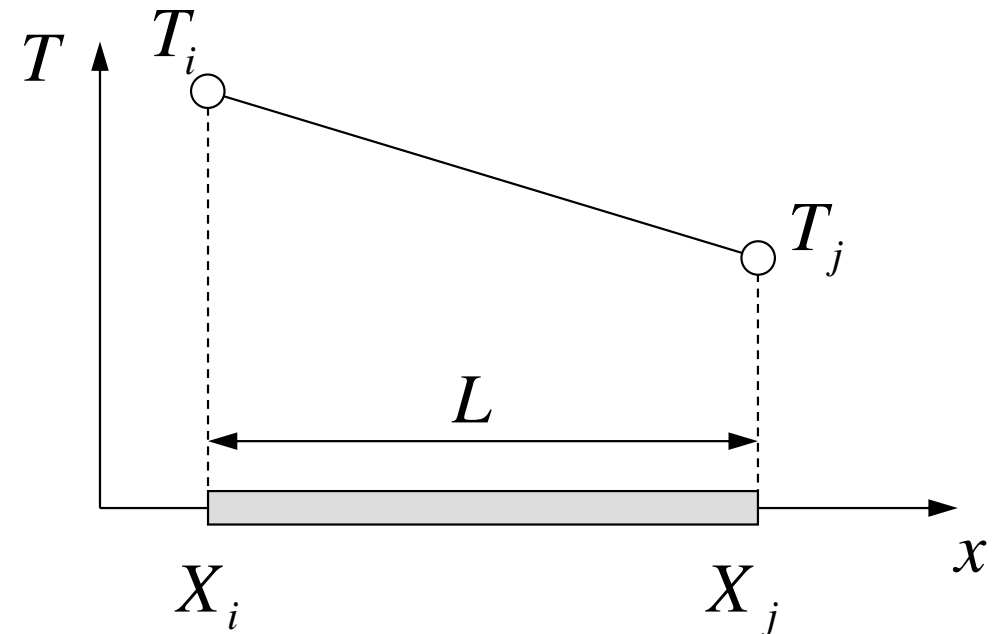
a_i 係数 (未知数)

一次元線形要素：形状関数（4/4）

- 形状関数はある節点で1の値をとり，他の節点では必ず0の値をとる：

$$N_i = \left(\frac{X_j - x}{L} \right), \quad N_j = \left(\frac{x - X_i}{L} \right)$$

確認してみよう



ガラーキン法の適用 (1/4)

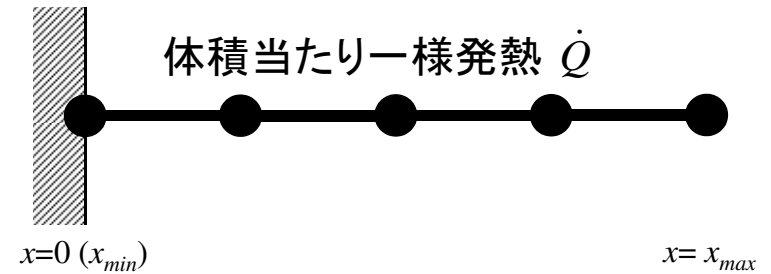
- 以下のような一次元熱伝導方程式を考慮する（熱伝導率一定）：

$$\lambda \left(\frac{d^2 T}{dx^2} \right) + \dot{Q} = 0$$

$T = [N]\{\phi\}$ 要素内の温度分布
 (マトリクス形式), 節点における温度を ϕ としてある。

- ガラーキン法に従い, 重み関数を $[N]$ とすると, 各要素において以下の積分方程式が得られる：

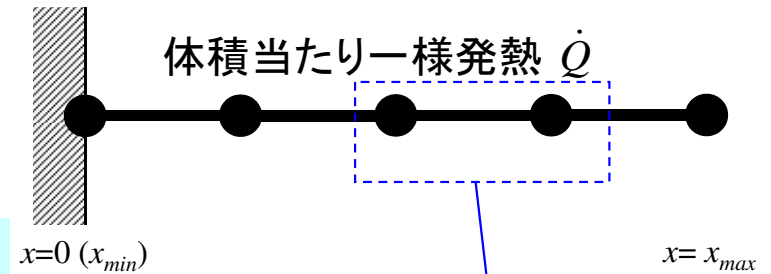
$$\int_V [N]^T \left\{ \lambda \left(\frac{d^2 T}{dx^2} \right) + \dot{Q} \right\} dV = 0$$



ガラーキン法の適用 (2/4)

- 一次元のグリーンの定理

$$\int_V A \left(\frac{d^2 B}{dx^2} \right) dV = \int_S A \frac{dB}{dx} dS - \int_V \left(\frac{dA}{dx} \frac{dB}{dx} \right) dV$$

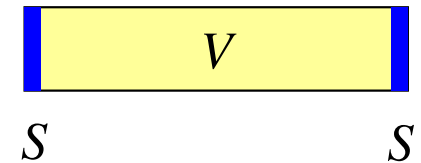


- これを前式の2階微分の部分に適用すると：

$$\int_V \lambda [N]^T \left(\frac{d^2 T}{dx^2} \right) dV = - \int_V \lambda \left(\frac{d[N]^T}{dx} \frac{dT}{dx} \right) dV + \int_S \lambda [N]^T \frac{dT}{dx} dS$$

- これに以下を代入する：

$$T = [N] \{ \phi \}, \quad \frac{dT}{dx} = \frac{d[N]}{dx} \{ \phi \} \quad \bar{q} = -\lambda \frac{dT}{dx}$$



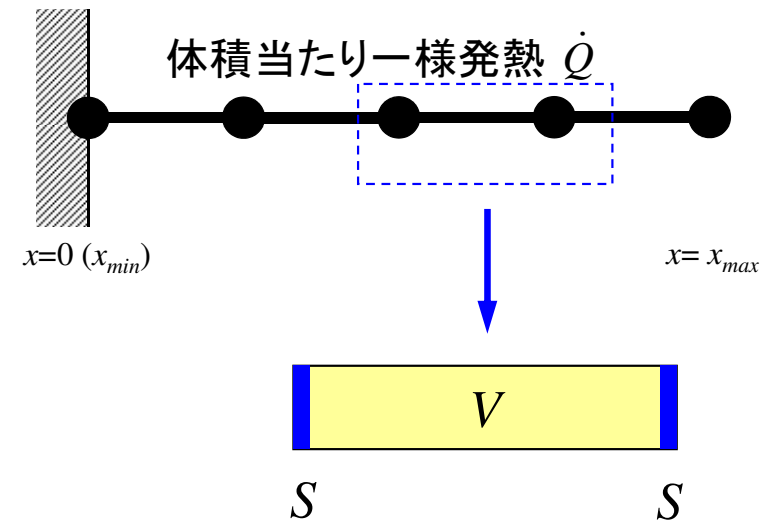
: 要素表面熱流量 [QL⁻²T⁻¹]

ガラーキン法の適用 (3/4)

- 更に体積あたり発熱量の項 \dot{Q} を加えて次式が得られる：

$$-\int_V \lambda \left(\frac{d[N]^T}{dx} \frac{d[N]}{dx} \right) dV \cdot \{\phi\}$$

$$-\int_S \bar{q} [N]^T dS + \int_V Q [N]^T dV = 0$$

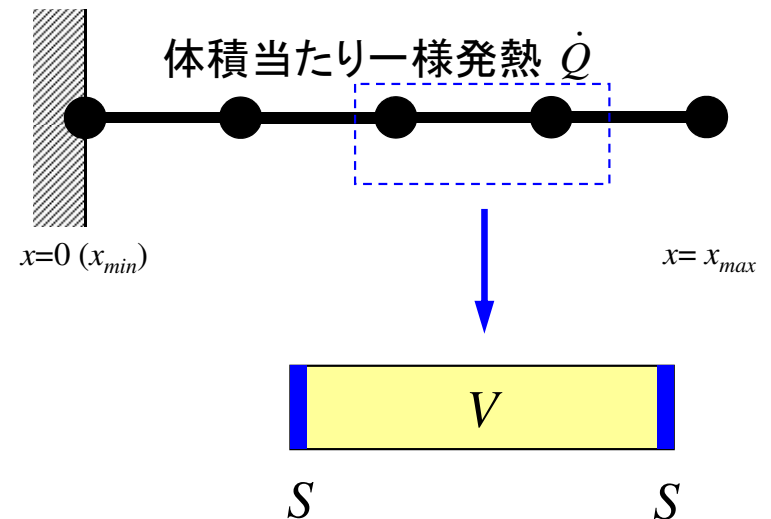


- この式を弱形式 (weak form) と呼ぶ。元の微分方程式では2階の微分が含まれていたが、上式では、グリーンンの定理によって1階微分に低減されている。
 - 弱形式によって近似関数 (形状関数, 内挿関数) に対する要求が弱くなっている：すなわち線形関数で2階微分の効果を記述できる。

ガラーキン法の適用 (4/4)

$$-\int_V \lambda \left(\frac{d[N]^T}{dx} \frac{d[N]}{dx} \right) dV \cdot \{\phi\}$$

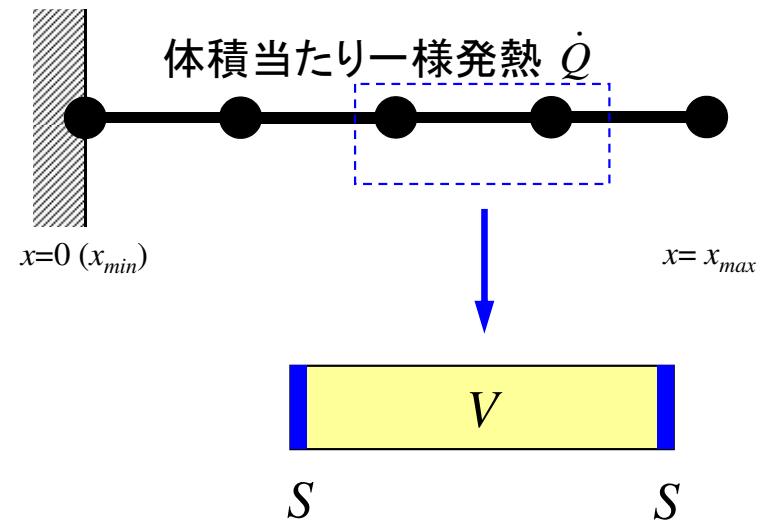
$$-\int_S \bar{q} [N]^T dS + \int_V \dot{Q} [N]^T dV = 0$$



- この項は要素境界で相殺するため、領域境界における項のみが残る。

弱形式と境界条件

- 未知数の値が直接与えられる (Dirichlet)
 - 重み関数=0となる
 - 第一種境界条件
 - 基本境界条件
 - essential boundary condition
- 未知数の導関数が与えられる (Neumann)
 - 弱形式中で自然に考慮される
 - 第二種境界条件
 - 自然境界条件
 - natural boundary condition
- (Robin)
 - DirichletとNeumannの線形結合
 - 第三種境界条件
 - 電磁気学：インピーダンス



$$-\int_V \lambda \left(\frac{d[N]^T}{dx} \frac{d[N]}{dx} \right) dV \cdot \{\phi\}$$

$$-\int_S \bar{q} [N]^T dS + \int_V \dot{Q} [N]^T dV = 0$$

$$\bar{q} = -\lambda \frac{dT}{dx} \text{ から得られる}$$

境界条件を考慮した弱形式：各要素

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

$$[k]^{(e)} = \int_V \lambda \left(\frac{d[N]^T}{dx} \frac{d[N]}{dx} \right) dV$$

$$\{f\}^{(e)} = \int_V \dot{Q} [N]^T dV - \int_S \bar{q} [N]^T dS$$

要素単位での積分：[k]

$$N_i = \left(\frac{X_j - x}{L} \right), \quad N_j = \left(\frac{x - X_i}{L} \right)$$

$$\frac{dN_i}{dx} = \left(\frac{-1}{L} \right), \quad \frac{dN_j}{dx} = \left(\frac{1}{L} \right)$$

$$\int_V \lambda \left(\frac{d[N]^T}{dx} \frac{d[N]}{dx} \right) dV$$

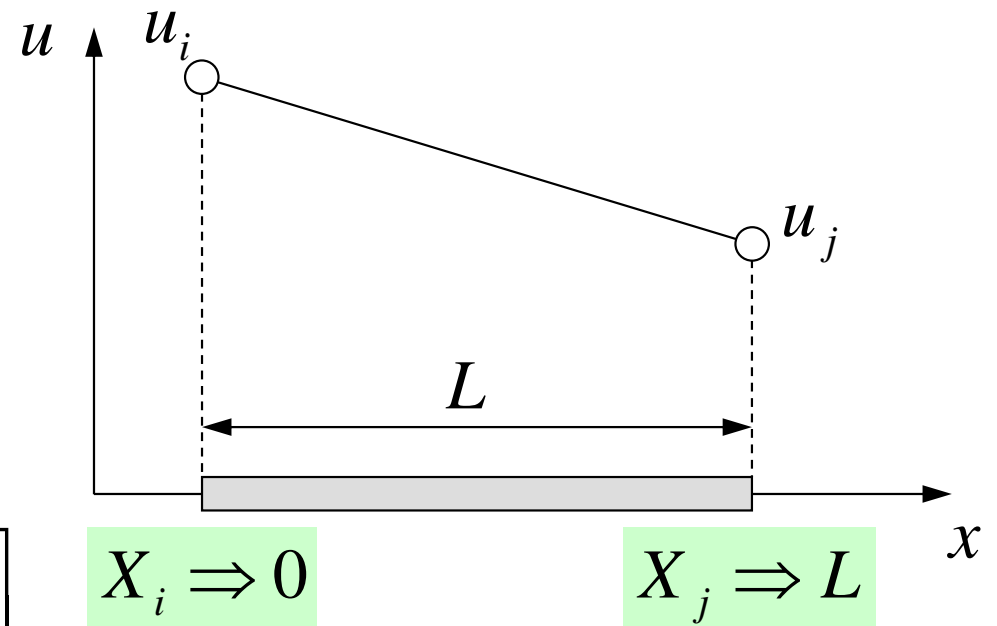
$$= \lambda \int_0^L \begin{bmatrix} -1/L \\ 1/L \end{bmatrix} [-1/L, 1/L] A dx$$

2x1 matrix

1x2 matrix

$$= \frac{\lambda A}{L^2} \int_0^L \begin{bmatrix} +1 & -1 \\ -1 & +1 \end{bmatrix} dx = \frac{\lambda A}{L} \begin{bmatrix} +1 & -1 \\ -1 & +1 \end{bmatrix}$$

A: 断面積, L: 要素長さ



$$N_i = \left(1 - \frac{x}{L} \right), \quad N_j = \left(\frac{x}{L} \right)$$

要素単位での積分： $\{f\}$ (1/2)

$$N_i = \left(\frac{X_j - x}{L} \right), \quad N_j = \left(\frac{x - X_i}{L} \right) \quad \frac{dN_i}{dx} = \left(\frac{-1}{L} \right), \quad \frac{dN_j}{dx} = \left(\frac{1}{L} \right)$$

$$N_i = \left(1 - \frac{x}{L} \right), \quad N_j = \left(\frac{x}{L} \right)$$

$$\int_V \dot{Q} [N]^T dV = \dot{Q} A \int_0^L \begin{bmatrix} 1 - x/L \\ x/L \end{bmatrix} dx = \frac{\dot{Q} A L}{2} \begin{Bmatrix} 1 \\ 1 \end{Bmatrix}$$

体積当たり発熱



A : 断面積, L : 要素長さ

要素単位での積分： $\{f\}$ (2/2)

$$N_i = \left(\frac{X_j - x}{L} \right), \quad N_j = \left(\frac{x - X_i}{L} \right) \quad \frac{dN_i}{dx} = \left(\frac{-1}{L} \right), \quad \frac{dN_j}{dx} = \left(\frac{1}{L} \right)$$

$$\int_V \dot{Q} [N]^T dV = \dot{Q} A \int_0^L \begin{bmatrix} 1 - x/L \\ x/L \end{bmatrix} dx = \frac{\dot{Q} A L}{2} \begin{Bmatrix} 1 \\ 1 \end{Bmatrix}$$

体積当たり発熱

$$\int_S \bar{q} [N]^T dS = \bar{q} A \Big|_{x=L} = \bar{q} A \begin{Bmatrix} 0 \\ 1 \end{Bmatrix}, \quad \bar{q} = -\lambda \frac{dT}{dx}$$

表面熱流束

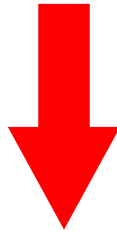


表面熱流束がこの断面のみに作用しているとする

全体方程式

- 要素単位の方程式を全体で足し合わせ,

$$[k]^{(e)} \{\phi\}^{(e)} = \{f\}^{(e)} \quad \text{要素マトリクス, 要素方程式}$$



$$[K] \cdot \{\Phi\} = \{F\} \quad \text{全体マトリクス, 全体方程式}$$

$$[K] = \sum [k], \quad \{F\} = \sum \{f\}$$

$$\{\Phi\}: \textit{global vector of } \{\phi\}$$

この連立一次方程式(全体方程式)
を解いてやればよい

ファイル準備 on PC

コピー, 展開

<http://nkl.cc.u-tokyo.ac.jp/files/fem-f.tar>

Windows上であれば, ¥Cygwin¥home¥YourName へコピー

```
>$ cd
```

```
>$ tar xvf fem-f.tar
```

```
>$ cd fem-f
```

以下のディレクトリが出来ていることを確認

1D fem3D

これらを以降 **<\$P-TOP>/1d, <\$P-TOP>/fem3D**

Your PC

Odyssey

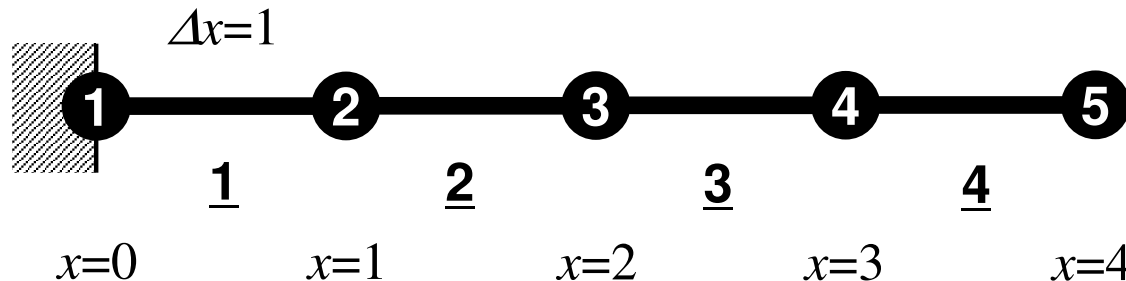
実行 (Cygwinではa.exe)

```
>$ cd <$P-TOP>/1d
>$ gfortran -O 1d.f
>$ ./a.out
```

制御ファイル input.dat

```
4
1.0 1.0 1.0 1.0
100
1.e-8
```

NE (要素数)
 Δx (要素長さL), Q , A , λ
 反復回数 (CG法後述)
 CG法の反復打切誤差



要素番号
 節点番号(全体)

結果

```
>$ ./a.out
```

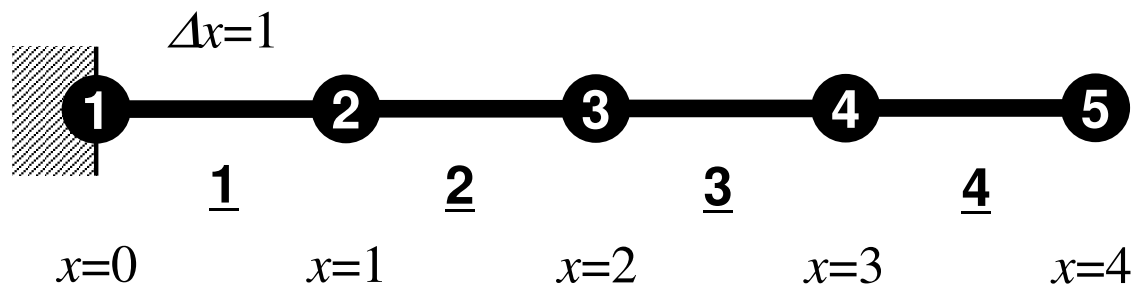
```
4 iters, RESID= 4.154074e-17
```

```
### TEMPERATURE
```

1	0.000000E+00	0.000000E+00
2	3.500000E+00	3.500000E+00
3	6.000000E+00	6.000000E+00
4	7.500000E+00	7.500000E+00
5	8.000000E+00	8.000000E+00

計算結果

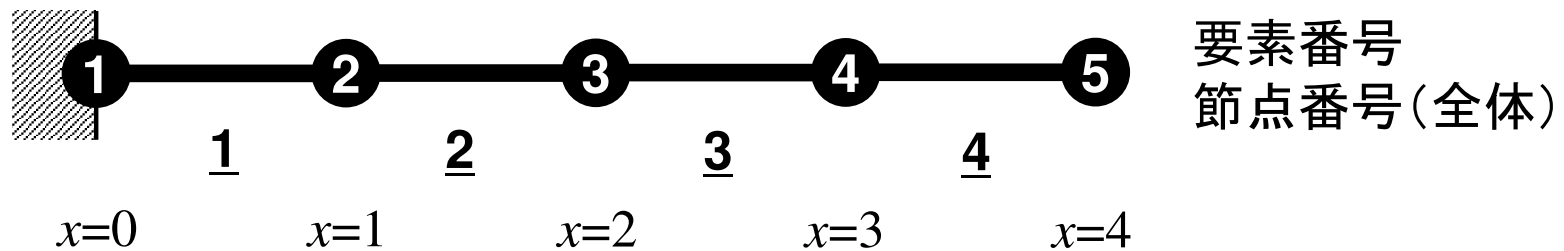
解析解



要素番号
節点番号(全体)

要素方程式とその重ね合わせ (1/3)

- 4要素, 5節点の例題



- 要素1の $[k], \{f\}$ は以下のようになる :

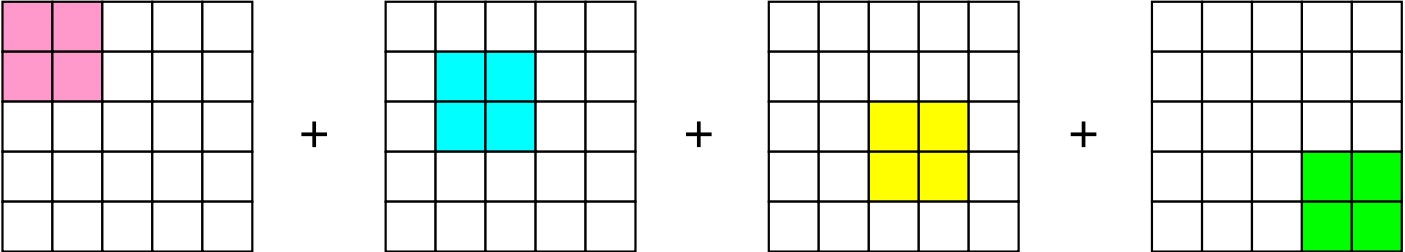
$$[k]^{(1)} = \frac{\lambda A}{L} \begin{bmatrix} +1 & -1 \\ -1 & +1 \end{bmatrix} \quad \{f\}^{(1)} = \frac{\dot{Q}AL}{2} \begin{Bmatrix} 1 \\ 1 \end{Bmatrix}$$

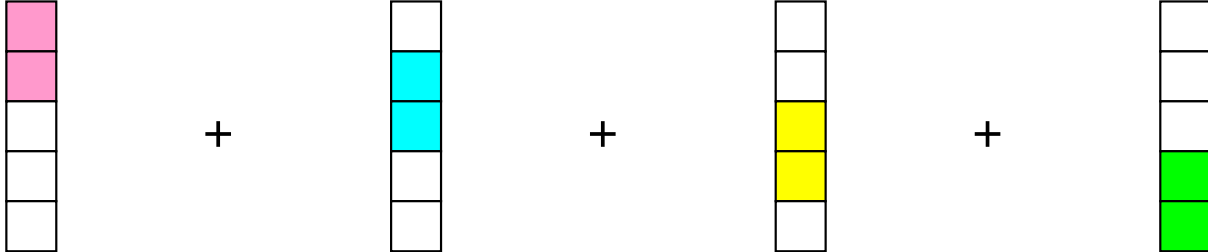
- 要素4については :

$$[k]^{(4)} = \frac{\lambda A}{L} \begin{bmatrix} +1 & -1 \\ -1 & +1 \end{bmatrix} \quad \{f\}^{(4)} = \frac{\dot{Q}AL}{2} \begin{Bmatrix} 1 \\ 1 \end{Bmatrix}$$

要素方程式とその重ね合わせ (2/3)

- これを順番に足していけばよい

$$[K] = \sum_{e=1}^4 [k]^{(e)} =$$


$$\{F\} = \sum_{e=1}^4 \{f\}^{(e)} =$$


要素方程式とその重ね合わせ (3/3)

- 差分との関係

$$[k]^{(e)} = \frac{\lambda A}{L} \begin{bmatrix} +1 & -1 \\ -1 & +1 \end{bmatrix}$$

$$[K] = \sum_{e=1}^4 [k]^{(e)} = \left[\begin{array}{c|c|c|c} \begin{matrix} +1 & -1 \\ -1 & +1 \end{matrix} & & & \\ \hline & \begin{matrix} +1 & -1 \\ -1 & +1 \end{matrix} & & \\ \hline & & \begin{matrix} +1 & -1 \\ -1 & +1 \end{matrix} & \\ \hline & & & \begin{matrix} +1 & -1 \\ -1 & +1 \end{matrix} \end{array} \right] \times \frac{\lambda A}{L}$$

$$= \begin{bmatrix} +1 & -1 & & & \\ -1 & +2 & -1 & & \\ & -1 & +2 & -1 & \\ & & -1 & +2 & -1 \\ & & & -1 & +1 \end{bmatrix} \times \frac{\lambda A}{L}$$

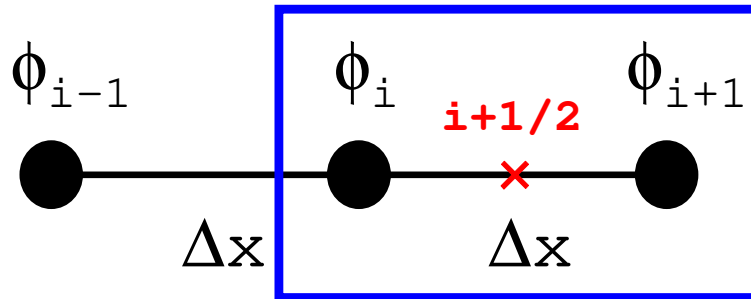
$$\begin{aligned} -\int_V \left(\frac{d^2 T}{dx^2} \right) dV &= -\int_V \left(\frac{T_{i+1} - 2T_i + T_{i-1}}{L^2} \right) dV \\ &= -\left(\frac{T_{i+1} - 2T_i + T_{i-1}}{L^2} \right) \cdot AL = -(T_{i+1} - 2T_i + T_{i-1}) \cdot \frac{A}{L} \end{aligned}$$

見覚えのある式が出てくる

有限要素法：一般に0の多い「疎」な係数行列

差分法における二階微分係数

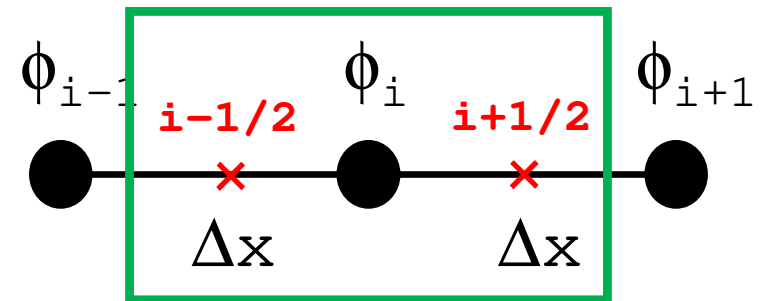
- \times (i と $i+1$ の中点)における微分係数



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

$\Delta x \rightarrow 0$ 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



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

要素ごとに物性，寸法が
異なっても簡単に対応が可能

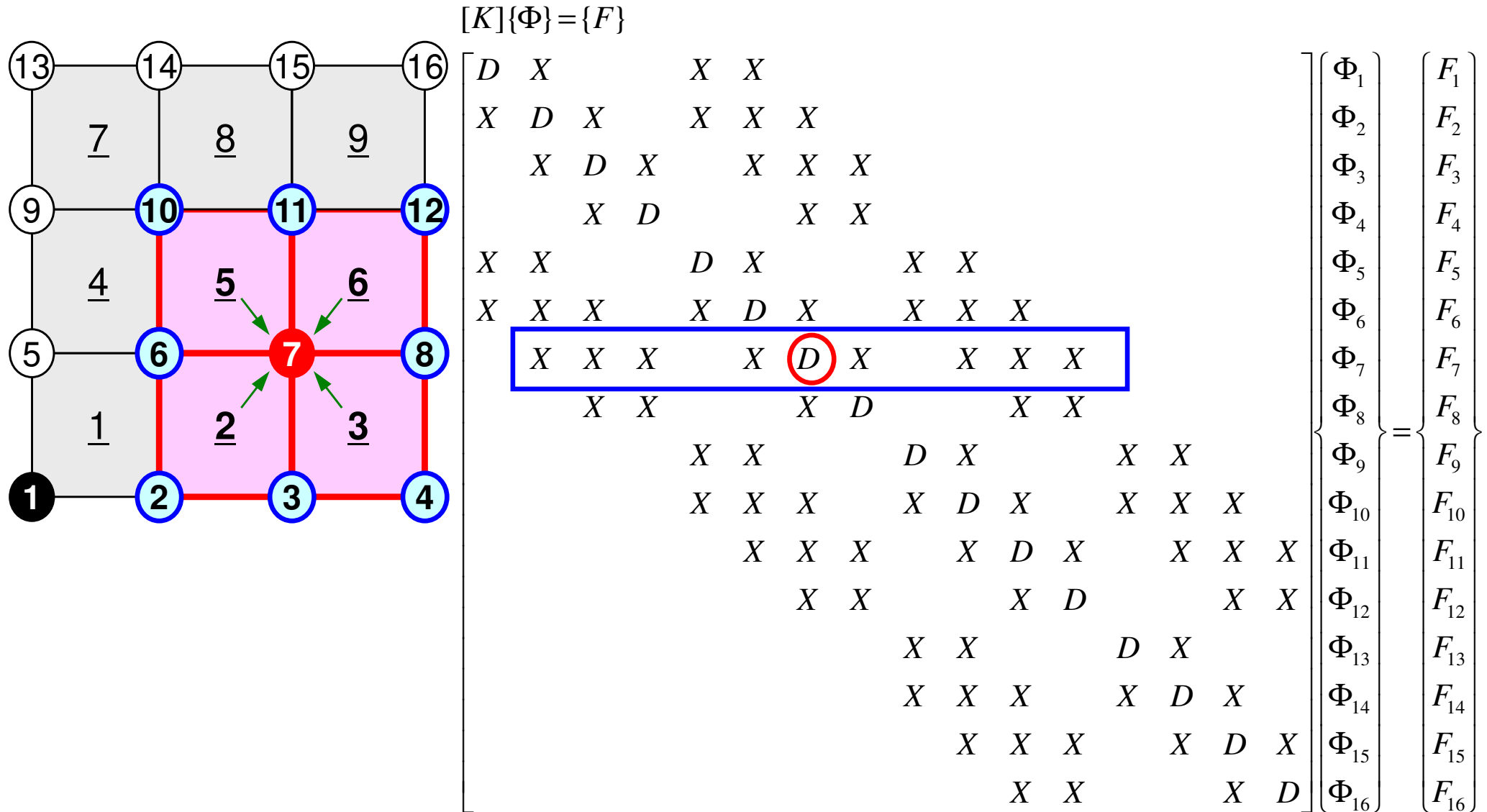
$$[k]^{(e)} = \frac{\lambda^{(e)} A^{(e)}}{L^{(e)}} \begin{bmatrix} +1 & -1 \\ -1 & +1 \end{bmatrix}$$

$$[K] = \sum_{e=1}^4 [k]^{(e)} =$$

$$\begin{matrix} \begin{matrix} +1 & -1 \\ -1 & +1 \end{matrix} & \times \frac{\lambda^{(1)} A^{(1)}}{L^{(1)}} & + & \begin{matrix} & & & & \\ & +1 & -1 & & \\ & -1 & +1 & & \\ & & & & \\ & & & & \end{matrix} & \times \frac{\lambda^{(2)} A^{(2)}}{L^{(2)}} \\ \\ \\ \\ \begin{matrix} & & & & \\ & & & & \\ & & +1 & -1 & \\ & & -1 & +1 & \\ & & & & \\ & & & & \end{matrix} & \times \frac{\lambda^{(3)} A^{(3)}}{L^{(3)}} & + & \begin{matrix} & & & & \\ & & & & \\ & & & & \\ & & & & \\ & & & +1 & -1 \\ & & & -1 & +1 \end{matrix} & \times \frac{\lambda^{(4)} A^{(4)}}{L^{(4)}} \end{matrix}$$

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



- ガラーキン法による一次元弾性問題の解法
- 連立一次方程式の解法
 - 共役勾配法
 - 前処理手法
- 疎行列格納法
- プログラムの内容

あとは出てきた全体方程式 (連立一次方程式)を解けばよい

- 多くの科学技術計算は, 最終的に大規模線形方程式 $Ax=b$ を解くことに帰着される。
- 様々な手法が提案されている
 - 疎行列 (sparse), 密行列 (dense)
 - 直接法 (direct), 反復法 (iterative)
- 密行列 (dense)
 - 境界要素法, スペクトル法など
- 疎行列 (sparse): 0の部分が多い
 - FEM, FDMなど

直接法 (Direct Method)

- Gaussの消去法, 完全LU分解
 - 逆行列 A^{-1} を直接求める(またはそれと同等の計算をする)
- 利点
 - 安定, 幅広いアプリケーションに適用可能
 - Partial Pivoting
 - 疎行列, 密行列いずれにも適用可能
- 欠点
 - 反復法よりもメモリ, 計算時間を必要とする
 - 密行列の場合, $O(N^3)$ の計算量
 - 大規模な計算向けではない
 - $O(N^2)$ の記憶容量, $O(N^3)$ の計算量

反復法 (Iterative Method) とは?

Linear Equations
連立一次方程式

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}$$

A **x** **b**

Initial Solution
初期解

$$\mathbf{x}^{(0)} = \begin{pmatrix} x_1^{(0)} \\ x_2^{(0)} \\ \vdots \\ x_n^{(0)} \end{pmatrix}$$

Starting from a initial vector $\mathbf{x}^{(0)}$, iterative method obtains the final converged solutions by iterations

$$\mathbf{X}^{(1)}, \mathbf{X}^{(2)}, \dots$$

反復法 (Iterative Method)

- 定常 (stationary) 法

- 反復計算中, 解ベクトル以外の変数は変化せず
- SOR, Gauss-Seidel, Jacobiなど
- 概して遅い

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b} \Rightarrow$$
$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{Mx}^{(k)} + \mathbf{Nb}$$

- 非定常 (nonstationary) 法

- 拘束, 最適化条件が加わる
- Krylov部分空間 (subspace) への写像を基底として使用するため, Krylov部分空間法とも呼ばれる
- CG (Conjugate Gradient: 共役勾配法)
- BiCGSTAB (Bi-Conjugate Gradient Stabilized)
- GMRES (Generalized Minimal Residual)

反復法 (Iterative Method) (続き)

- 利点
 - 直接法と比較して, メモリ使用量, 計算量が少ない。
 - 並列計算には適している。
- 欠点
 - 収束性が, アプリケーション, 境界条件の影響を受けやすい。
 - 前処理 (preconditioning) が重要。

非定常反復法：クリロフ部分空間法 (1/2)

Krylov Subspace Method

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b} \Rightarrow \mathbf{x} = \mathbf{b} + (\mathbf{I} - \mathbf{A})\mathbf{x}$$

以下の反復式を導入し $\mathbf{x}_0, \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_k$ を求める:

$$\begin{aligned}\mathbf{x}_k &= \mathbf{b} + (\mathbf{I} - \mathbf{A})\mathbf{x}_{k-1} \\ &= (\mathbf{b} - \mathbf{Ax}_{k-1}) + \mathbf{x}_{k-1}\end{aligned}$$

$$= \mathbf{r}_{k-1} + \mathbf{x}_{k-1}$$

where $\mathbf{r}_k = \mathbf{b} - \mathbf{Ax}_k$: 残差ベクトル
(residual)



$$\mathbf{x}_k = \mathbf{x}_0 + \sum_{i=0}^{k-1} \mathbf{r}_i$$

$$\begin{aligned}\mathbf{r}_k &= \mathbf{b} - \mathbf{Ax}_k = \mathbf{b} - \mathbf{A}(\mathbf{r}_{k-1} + \mathbf{x}_{k-1}) \\ &= (\mathbf{b} - \mathbf{Ax}_{k-1}) - \mathbf{Ar}_{k-1} = \mathbf{r}_{k-1} - \mathbf{Ar}_{k-1} = (\mathbf{I} - \mathbf{A})\mathbf{r}_{k-1}\end{aligned}$$

非定常反復法: クリロフ部分空間法 (2/2)

Krylov Subspace Method

$$\mathbf{x}_k = \mathbf{x}_0 + \sum_{i=0}^{k-1} \mathbf{r}_i = \mathbf{x}_0 + \mathbf{r}_0 + \sum_{i=0}^{k-2} (\mathbf{I} - \mathbf{A})\mathbf{r}_i = \mathbf{x}_0 + \mathbf{r}_0 + \sum_{i=1}^{k-1} (\mathbf{I} - \mathbf{A})^i \mathbf{r}_0$$

$$\mathbf{z}_k = \mathbf{r}_0 + \sum_{i=1}^{k-1} (\mathbf{I} - \mathbf{A})^i \mathbf{r}_0 = \left[\mathbf{I} + \sum_{i=1}^{k-1} (\mathbf{I} - \mathbf{A})^i \right] \mathbf{r}_0$$



\mathbf{z}_k はk次のクリロフ部分空間 (Krylov Subspace) に属するベクトル, 問題はクリロフ部分空間からどのようにして解の近似ベクトル \mathbf{x}_k を求めるかにある:

$$\left[\mathbf{r}_0, \mathbf{A}\mathbf{r}_0, \mathbf{A}^2\mathbf{r}_0, \dots, \mathbf{A}^{k-1}\mathbf{r}_0 \right]$$

代表的な反復法：共役勾配法

- Conjugate Gradient法, 略して「CG」法
 - 最も代表的な「非定常」反復法
- 対称正定値行列 (Symmetric Positive Definite: SPD)
 - 任意のベクトル $\{x\}$ に対して $\{x\}^T[A]\{x\} > 0$
 - 全対角成分 > 0 , 全固有値 > 0 , 全部分行列式 > 0 と同値
 - (ガラーキソ法) 熱伝導, 弾性, ねじり: 本コードの場合も SPD
- アルゴリズム
 - 最急降下法 (Steepest Descent Method) の変種
 - $x^{(i)} = x^{(i-1)} + \alpha_i p^{(i)}$
 - $x^{(i)}$: 反復解, $p^{(i)}$: 探索方向, α_i : 定数)
 - 厳密解を y とするとき $\{x-y\}^T[A]\{x-y\}$ を最小とするような $\{x\}$ を求める。
 - 詳細は参考文献参照
 - 例えば: 森正武「数値解析(第2版)」(共立出版)

$$\det \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} & \cdots & a_{2n} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} & \cdots & a_{3n} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} & \cdots & a_{4n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & a_{n3} & a_{n4} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix}$$

共役勾配法のアルゴリズム

```

Compute  $r^{(0)} = b - [A]x^{(0)}$ 
for  $i = 1, 2, \dots$ 
   $z^{(i-1)} = r^{(i-1)}$ 
   $\rho_{i-1} = r^{(i-1)} z^{(i-1)}$ 
  if  $i = 1$ 
     $p^{(1)} = z^{(0)}$ 
  else
     $\beta_{i-1} = \rho_{i-1} / \rho_{i-2}$ 
     $p^{(i)} = z^{(i-1)} + \beta_{i-1} p^{(i-1)}$ 
  endif
   $q^{(i)} = [A]p^{(i)}$ 
   $\alpha_i = \rho_{i-1} / p^{(i)} q^{(i)}$ 
   $x^{(i)} = x^{(i-1)} + \alpha_i p^{(i)}$ 
   $r^{(i)} = r^{(i-1)} - \alpha_i q^{(i)}$ 
  check convergence  $|r|$ 
end

```

- 行列ベクトル積
- ベクトル内積
- ベクトル定数倍の加減
 - DAXPY (Double Precision: $a\{X\} + \{Y\}$)

$x^{(i)}$: ベクトル

α_i : スカラー

共役勾配法のアルゴリズム

```

Compute  $r^{(0)} = b - [A]x^{(0)}$ 
for  $i = 1, 2, \dots$ 
   $z^{(i-1)} = r^{(i-1)}$ 
   $\rho_{i-1} = r^{(i-1)} z^{(i-1)}$ 
  if  $i = 1$ 
     $p^{(1)} = z^{(0)}$ 
  else
     $\beta_{i-1} = \rho_{i-1} / \rho_{i-2}$ 
     $p^{(i)} = z^{(i-1)} + \beta_{i-1} p^{(i-1)}$ 
  endif
   $q^{(i)} = [A]p^{(i)}$ 
   $\alpha_i = \rho_{i-1} / p^{(i)} q^{(i)}$ 
   $x^{(i)} = x^{(i-1)} + \alpha_i p^{(i)}$ 
   $r^{(i)} = r^{(i-1)} - \alpha_i q^{(i)}$ 
  check convergence  $|r|$ 
end

```

- 行列ベクトル積
- ベクトル内積
- ベクトル定数倍の加減

$x^{(i)}$: ベクトル

α_i : スカラー

共役勾配法のアルゴリズム

```

Compute  $r^{(0)} = b - [A]x^{(0)}$ 
for  $i = 1, 2, \dots$ 
   $z^{(i-1)} = r^{(i-1)}$ 
   $\rho_{i-1} = r^{(i-1)} z^{(i-1)}$ 
  if  $i = 1$ 
     $p^{(1)} = z^{(0)}$ 
  else
     $\beta_{i-1} = \rho_{i-1} / \rho_{i-2}$ 
     $p^{(i)} = z^{(i-1)} + \beta_{i-1} p^{(i-1)}$ 
  endif
   $q^{(i)} = [A]p^{(i)}$ 
   $\alpha_i = \rho_{i-1} / p^{(i)} q^{(i)}$ 
   $x^{(i)} = x^{(i-1)} + \alpha_i p^{(i)}$ 
   $r^{(i)} = r^{(i-1)} - \alpha_i q^{(i)}$ 
  check convergence  $|r|$ 
end

```

- 行列ベクトル積
- ベクトル内積
- ベクトル定数倍の加減

$x^{(i)}$: ベクトル

α_i : スカラー

共役勾配法のアルゴリズム

```

Compute  $r^{(0)} = b - [A]x^{(0)}$ 
for  $i = 1, 2, \dots$ 
   $z^{(i-1)} = r^{(i-1)}$ 
   $\rho_{i-1} = r^{(i-1)} z^{(i-1)}$ 
  if  $i = 1$ 
     $p^{(1)} = z^{(0)}$ 
  else
     $\beta_{i-1} = \rho_{i-1} / \rho_{i-2}$ 
     $p^{(i)} = z^{(i-1)} + \beta_{i-1} p^{(i-1)}$ 
  endif
   $q^{(i)} = [A]p^{(i)}$ 
   $\alpha_i = \rho_{i-1} / p^{(i)} q^{(i)}$ 
   $x^{(i)} = x^{(i-1)} + \alpha_i p^{(i)}$ 
   $r^{(i)} = r^{(i-1)} - \alpha_i q^{(i)}$ 
  check convergence  $|r|$ 
end

```

- 行列ベクトル積
- ベクトル内積
- ベクトル定数倍の加減
 - DAXPY (Double Precision: $a\{X\} + \{Y\}$)

$x^{(i)}$: ベクトル

α_i : スカラー

共役勾配法のアルゴリズム

```
Compute  $r^{(0)} = b - [A]x^{(0)}$ 
for  $i = 1, 2, \dots$ 
   $z^{(i-1)} = r^{(i-1)}$ 
   $\rho_{i-1} = r^{(i-1)} z^{(i-1)}$ 
  if  $i = 1$ 
     $p^{(1)} = z^{(0)}$ 
  else
     $\beta_{i-1} = \rho_{i-1} / \rho_{i-2}$ 
     $p^{(i)} = z^{(i-1)} + \beta_{i-1} p^{(i-1)}$ 
  endif
   $q^{(i)} = [A]p^{(i)}$ 
   $\alpha_i = \rho_{i-1} / p^{(i)} q^{(i)}$ 
   $x^{(i)} = x^{(i-1)} + \alpha_i p^{(i)}$ 
   $r^{(i)} = r^{(i-1)} - \alpha_i q^{(i)}$ 
  check convergence  $|r|$ 
end
```

$x^{(i)}$: ベクトル

α_i : スカラー

CG法アルゴリズムの導出(1/5)

y を厳密解 ($Ay=b$) とするとき, 下式を最小にする x を求める:

$$(x-y)^T [A](x-y)$$

$$\begin{aligned} (x-y)^T [A](x-y) &= (x, Ax) - (y, Ax) - (x, Ay) + (y, Ay) \\ &= (x, Ax) - 2(x, Ay) + (y, Ay) = (x, Ax) - 2(x, b) + \underline{(y, b)} \quad \text{定数} \end{aligned}$$

従って, 下記 $f(x)$ を最小にする x を求めればよい:

$$f(x) = \frac{1}{2}(x, Ax) - (x, b)$$

$$f(x+h) = f(x) + (h, Ax-b) + \frac{1}{2}(h, Ah)$$

任意のベクトル h

$$f(x) = \frac{1}{2}(x, Ax) - (x, b)$$

$$f(x+h) = f(x) + (h, Ax-b) + \frac{1}{2}(h, Ah)$$

•任意のベクトル h

$$\begin{aligned} f(x+h) &= \frac{1}{2}(x+h, A(x+h)) - (x+h, b) \\ &= \frac{1}{2}(x+h, Ax) + \frac{1}{2}(x+h, Ah) - (x, b) - (h, b) \\ &= \frac{1}{2}(x, Ax) + \frac{1}{2}(h, Ax) + \frac{1}{2}(x, Ah) + \frac{1}{2}(h, Ah) - (x, b) - (h, b) \\ &= \frac{1}{2}(x, Ax) - (x, b) + (h, Ax) - (h, b) + \frac{1}{2}(h, Ah) \\ &= f(x) + (h, Ax-b) + \frac{1}{2}(h, Ah) \end{aligned}$$

CG法アルゴリズムの導出(2/5)

CG法は任意の $x^{(0)}$ から始めて, $f(x)$ の最小値を逐次探索する。
今, k 番目の近似値 $x^{(k)}$ と探索方向 $p^{(k)}$ が決まったとすると:

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha_k p^{(k)}$$

$f(x^{(k+1)})$ を最小にするためには:

$$f(x^{(k)} + \alpha_k p^{(k)}) = \frac{1}{2} \alpha_k^2 (p^{(k)}, Ap^{(k)}) - \alpha_k (p^{(k)}, b - Ax^{(k)}) + f(x^{(k)})$$
$$\frac{\partial f(x^{(k)} + \alpha_k p^{(k)})}{\partial \alpha_k} = 0 \Rightarrow \alpha_k = \frac{(p^{(k)}, b - Ax^{(k)})}{(p^{(k)}, Ap^{(k)})} = \frac{(p^{(k)}, r^{(k)})}{(p^{(k)}, Ap^{(k)})} \quad (1)$$

$r^{(k)} = b - Ax^{(k)}$ は第 k 近似に対する残差

CG法アルゴリズムの導出(3/5)

残差 $r^{(k)}$ も以下の式によって計算できる:

$$r^{(k+1)} = r^{(k)} - \alpha_k Ap^{(k)}$$

$$(2) \quad r^{(k+1)} = b - Ax^{(k+1)}, \quad r^{(k)} = b - Ax^{(k)}$$

$$r^{(k+1)} - r^{(k)} = -Ax^{(k+1)} + Ax^{(k)} = -\alpha_k Ap^{(k)}$$

探索方向を以下の漸化式によって求める:

$$p^{(k+1)} = r^{(k+1)} + \beta_k p^{(k)}, \quad r^{(0)} = p^{(0)} \quad (3)$$

本当のところは下記のように(k+1)回目に厳密解 y が求めれば良いのであるが, 解がわかっていない場合は困難...

$$y = x^{(k+1)} + \alpha_{k+1} p^{(k+1)}$$

CG法アルゴリズムの導出(4/5)

ところで、下式のような都合の良い直交関係がある:

$$(Ap^{(k)}, y - x^{(k+1)}) = 0$$

$$\begin{aligned} (Ap^{(k)}, y - x^{(k+1)}) &= (p^{(k)}, Ay - Ax^{(k+1)}) = (p^{(k)}, b - Ax^{(k+1)}) \\ &= (p^{(k)}, b - A[x^{(k)} + \alpha_k p^{(k)}]) = (p^{(k)}, b - Ax^{(k)} - \alpha_k Ap^{(k)}) \\ &= (p^{(k)}, r^{(k)} - \alpha_k Ap^{(k)}) = (p^{(k)}, r^{(k)}) - \alpha_k (p^{(k)}, Ap^{(k)}) = 0 \end{aligned}$$

$$\therefore \alpha_k = \frac{(p^{(k)}, r^{(k)})}{(p^{(k)}, Ap^{(k)})}$$

従って以下が成立する:

$$(Ap^{(k)}, y - x^{(k+1)}) = (Ap^{(k)}, \alpha_{k+1} p^{(k+1)}) = 0 \Rightarrow (p^{(k+1)}, Ap^{(k)}) = 0$$

CG法アルゴリズムの導出(5/5)

$$\begin{aligned} (p^{(k+1)}, Ap^{(k)}) &= (r^{(k+1)} + \beta_k p^{(k)}, Ap^{(k)}) = (r^{(k+1)}, Ap^{(k)}) + \beta_k (p^{(k)}, Ap^{(k)}) = 0 \\ \Rightarrow \beta_k &= \frac{-(r^{(k+1)}, Ap^{(k)})}{(p^{(k)}, Ap^{(k)})} \quad (4) \end{aligned}$$

$(p^{(k+1)}, Ap^{(k)}) = 0$ $p^{(k)}$ と $p^{(k+1)}$ が行列Aに関して共役 (conjugate)

```

Compute  $p^{(0)} = r^{(0)} = b - [A]x^{(0)}$ 
for  $i = 1, 2, \dots$ 
  calc.  $\alpha_{i-1}$ 
   $x^{(i)} = x^{(i-1)} + \alpha_{i-1}p^{(i-1)}$ 
   $r^{(i)} = r^{(i-1)} - \alpha_{i-1}[A]p^{(i-1)}$ 

  check convergence  $|r|$ 
  (if not converged)
  calc.  $\beta_{i-1}$ 
   $p^{(i)} = r^{(i)} + \beta_{i-1}p^{(i-1)}$ 
end

```

$$\alpha_{i-1} = \frac{(p^{(i-1)}, r^{(i-1)})}{(p^{(i-1)}, Ap^{(i-1)})}$$

$$\beta_{i-1} = \frac{-(r^{(i)}, Ap^{(i-1)})}{(p^{(i-1)}, Ap^{(i-1)})}$$

CG法アルゴリズム

任意の (i,j) に対して以下の共役関係が得られる:

$$(p^{(i)}, Ap^{(j)}) = 0 \quad (i \neq j)$$

探索方向 $p^{(k)}$, 残差ベクトル $r^{(k)}$ についても以下の関係が成立する:

$$(r^{(i)}, r^{(j)}) = 0 \quad (i \neq j), \quad (p^{(k)}, r^{(k)}) = (r^{(k)}, r^{(k)})$$

N次元空間で互いに直交で一次独立な残差ベクトル $r^{(k)}$ はN個しか存在しない, 従って共役勾配法は未知数がN個のときにN回以内に収束する \Rightarrow 実際は丸め誤差の影響がある(条件数が大きい場合)

Top 10 Algorithms in the 20th Century (SIAM)

<http://www.siam.org/news/news.php?id=637>

モンテカルロ法, シンプレックス法, **クリロフ部分空間法**, 行列分解法, 最適化Fortranコンパイラ, QR法, クイックソート, FFT, 整数関係アルゴリズム, FMM(高速多重極法)

Proof (1/3)

Mathematical Induction

数学的帰納法

$$(r^{(i)}, r^{(j)}) = 0 \quad (i \neq j)$$

$$(p^{(i)}, Ap^{(j)}) = 0 \quad (i \neq j)$$

直交性

共役性

$$(1) \quad \alpha_k = \frac{(p^{(k)}, r^{(k)})}{(p^{(k)}, Ap^{(k)})}$$

$$(2) \quad r^{(k+1)} = r^{(k)} - \alpha_k Ap^{(k)}$$

$$(3) \quad p^{(k+1)} = r^{(k+1)} + \beta_k p^{(k)}, \quad r^{(0)} = p^{(0)}$$

$$(4) \quad \beta_k = \frac{-(r^{(k+1)}, Ap^{(k)})}{(p^{(k)}, Ap^{(k)})}$$

Proof (2/3)

Mathematical Induction

数学的帰納法

$$\begin{aligned} (r^{(i)}, r^{(j)}) &= 0 \quad (i \neq j) \\ (p^{(i)}, Ap^{(j)}) &= 0 \quad (i \neq j) \end{aligned} \quad (*)$$

(*) is satisfied for $i \leq k, j \leq k$ where $i \neq j$

$$\begin{aligned} \text{if } i < k \quad (r^{(k+1)}, r^{(i)}) &= (r^{(i)}, r^{(k+1)}) \stackrel{(2)}{=} (r^{(i)}, r^{(k)} - \alpha_k Ap^{(k)}) \\ &\stackrel{(*)}{=} -\alpha_k (r^{(i)}, Ap^{(k)}) \stackrel{(3)}{=} -\alpha_k (p^{(i)} - \beta_{i-1} p^{(i-1)}, Ap^{(k)}) \\ &= -\alpha_k (p^{(i)}, Ap^{(k)}) + \alpha_k \beta_{i-1} (p^{(i-1)}, Ap^{(k)}) \stackrel{(*)}{=} 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{if } i = k \quad (r^{(k+1)}, r^{(k)}) &\stackrel{(2)}{=} (r^{(k)}, r^{(k)}) - (r^{(k)}, \alpha_k Ap^{(k)}) \\ &\stackrel{(3)}{=} (r^{(k)}, r^{(k)}) - (p^{(k)} - \beta_{k-1} p^{(k-1)}, \alpha_k Ap^{(k)}) \\ &\stackrel{(*)}{=} (r^{(k)}, r^{(k)}) - \alpha_k (p^{(k)}, Ap^{(k)}) \stackrel{(1)}{=} (r^{(k)}, r^{(k)}) - (p^{(k)}, r^{(k)}) \\ &\stackrel{(3)}{=} (r^{(k)}, r^{(k)}) - (\beta_{k-1} p^{(k-1)} + r^{(k)}, r^{(k)}) \\ &= -\beta_{k-1} (p^{(k-1)}, r^{(k)}) \stackrel{(2)}{=} -\beta_{k-1} (p^{(k-1)}, r^{(k-1)} - \alpha_{k-1} Ap^{(k-1)}) \\ &= -\beta_{k-1} \left\{ (p^{(k-1)}, r^{(k-1)}) - \alpha_{k-1} (p^{(k-1)}, Ap^{(k-1)}) \right\} \stackrel{(1)}{=} 0 \end{aligned}$$

$$(1) \alpha_k = \frac{(p^{(k)}, r^{(k)})}{(p^{(k)}, Ap^{(k)})}$$

$$(2) r^{(k+1)} = r^{(k)} - \alpha_k Ap^{(k)}$$

$$(3) p^{(k+1)} = r^{(k+1)} + \beta_k p^{(k)}$$

$$(4) \beta_k = \frac{-(r^{(k+1)}, Ap^{(k)})}{(p^{(k)}, Ap^{(k)})}$$

Proof (3/3)

Mathematical Induction

数学的帰納法

$$\begin{aligned} (r^{(i)}, r^{(j)}) &= 0 \quad (i \neq j) \\ (p^{(i)}, Ap^{(j)}) &= 0 \quad (i \neq j) \end{aligned} \quad (*)$$

(*) is satisfied for $i \leq k, j \leq k$ where $i \neq j$

$$\begin{aligned} \text{if } i < k \quad (p^{(k+1)}, Ap^{(i)}) &\stackrel{(3)}{=} (r^{(k+1)} + \beta_k p^{(k)}, Ap^{(i)}) \\ &\stackrel{(*)}{=} (r^{(k+1)}, Ap^{(i)}) \end{aligned}$$

$$\stackrel{(2)}{=} \frac{1}{\alpha_i} (r^{(k+1)}, r^{(i)} - r^{(i+1)}) = 0$$

$$\begin{aligned} \text{if } i = k \quad (p^{(k+1)}, Ap^{(k)}) &\stackrel{(3)}{=} (r^{(k+1)}, Ap^{(k)}) + \beta_k (p^{(k)}, Ap^{(k)}) \\ &\stackrel{(4)}{=} 0 \end{aligned}$$

$$(1) \alpha_k = \frac{(p^{(k)}, r^{(k)})}{(p^{(k)}, Ap^{(k)})}$$

$$(2) r^{(k+1)} = r^{(k)} - \alpha_k Ap^{(k)}$$

$$(3) p^{(k+1)} = r^{(k+1)} + \beta_k p^{(k)}$$

$$(4) \beta_k = \frac{-(r^{(k+1)}, Ap^{(k)})}{(p^{(k)}, Ap^{(k)})}$$

$$\left(r^{(k+1)}, r^{(k)} \right) = 0$$

$$\left(r^{(k+1)}, r^{(k)} \right) \stackrel{(2)}{=} \left(r^{(k)}, r^{(k)} \right) - \left(r^{(k)}, \alpha_k A p^{(k)} \right)$$

$$\stackrel{(3)}{=} \left(r^{(k)}, r^{(k)} \right) - \left(p^{(k)} - \beta_{k-1} p^{(k-1)}, \alpha_k A p^{(k)} \right)$$

$$\stackrel{(*)}{=} \left(r^{(k)}, r^{(k)} \right) - \alpha_k \left(p^{(k)}, A p^{(k)} \right) \stackrel{(1)}{=} \left(r^{(k)}, r^{(k)} \right) - \left(p^{(k)}, r^{(k)} \right) = 0$$

$$\therefore \left(r^{(k)}, r^{(k)} \right) = \left(p^{(k)}, r^{(k)} \right)$$

$$(1) \alpha_k = \frac{\left(p^{(k)}, r^{(k)} \right)}{\left(p^{(k)}, A p^{(k)} \right)}$$

$$(2) r^{(k+1)} = r^{(k)} - \alpha_k A p^{(k)}$$

$$(3) p^{(k+1)} = r^{(k+1)} + \beta_k p^{(k)}$$

$$(4) \beta_k = \frac{-\left(r^{(k+1)}, A p^{(k)} \right)}{\left(p^{(k)}, A p^{(k)} \right)}$$

$$\alpha_k, \beta_k$$

実際は α_k, β_k はもうちょっと簡単な形に変形できる:

$$\alpha_k = \frac{(p^{(k)}, b - Ax^{(k)})}{(p^{(k)}, Ap^{(k)})} = \frac{(p^{(k)}, r^{(k)})}{(p^{(k)}, Ap^{(k)})} = \frac{(r^{(k)}, r^{(k)})}{(p^{(k)}, Ap^{(k)})}$$

$$\because (p^{(k)}, r^{(k)}) = (r^{(k)}, r^{(k)})$$

$$\beta_k = \frac{-(r^{(k+1)}, Ap^{(k)})}{(p^{(k)}, Ap^{(k)})} = \frac{(r^{(k+1)}, r^{(k+1)})}{(r^{(k)}, r^{(k)})}$$

$$\because (r^{(k+1)}, Ap^{(k)}) = \frac{(r^{(k+1)}, r^{(k)} - r^{(k+1)})}{\alpha_k} = -\frac{(r^{(k+1)}, r^{(k+1)})}{\alpha_k}$$

共役勾配法 (CG法) のアルゴリズム

```

Compute  $r^{(0)} = b - [A]x^{(0)}$ 
for  $i = 1, 2, \dots$ 
   $\rho_{i-1} = r^{(i-1)} \cdot r^{(i-1)}$ 
  if  $i = 1$ 
     $p^{(1)} = r^{(0)}$ 
  else
     $\beta_{i-1} = \rho_{i-1} / \rho_{i-2}$ 
     $p^{(i)} = r^{(i-1)} + \beta_{i-1} p^{(i-1)}$ 
  endif
   $q^{(i)} = [A]p^{(i)}$ 
   $\alpha_i = \rho_{i-1} / p^{(i)} \cdot q^{(i)}$ 
   $x^{(i)} = x^{(i-1)} + \alpha_i p^{(i)}$ 
   $r^{(i)} = r^{(i-1)} - \alpha_i q^{(i)}$ 
  check convergence  $|r|$ 
end

```

$x^{(i)}$: Vector

α_i : Scalar

$$\beta_{i-1} = \frac{\left(r^{(i-1)}, r^{(i-1)} \right)}{\left(r^{(i-2)}, r^{(i-2)} \right)} \quad \left(= \rho_{i-1} \right)$$

$$\alpha_i = \frac{\left(r^{(i-1)}, r^{(i-1)} \right)}{\left(p^{(i)}, Ap^{(i)} \right)} \quad \left(= \rho_{i-1} \right)$$

前処理 (preconditioning) とは?

- 反復法の収束は係数行列の固有値分布に依存
 - 固有値分布が少なく, かつ1に近いほど収束が早い(単位行列)
 - 条件数 (condition number) (対称正定) = 最大最小固有値比
 - 条件数が1に近いほど収束しやすい
- もとの係数行列 $[A]$ に良く似た前処理行列 $[M]$ を適用することによって固有値分布を改善する。
 - 前処理行列 $[M]$ によって元の方程式 $[A] \{x\} = \{b\}$ を $[A'] \{x\} = \{b'\}$ へと変換する。ここで $[A'] = [M]^{-1} [A]$, $\{b'\} = [M]^{-1} \{b\}$ である。
 - $[A'] = [M]^{-1} [A]$ が単位行列に近ければ良い
 - より一般的には $[A'] \{x'\} = \{b'\}$ ($[A'] = [M_L]^{-1} [A] [M_R]^{-1}$, $\{b'\} = [M_L]^{-1} \{b\}$, $\{x'\} = [M_R] \{x\}$)
 - $[M_L] / [M_R]$: 左 / 右前処理 (left/right preconditioning)

前処理付き共役勾配法のアルゴリズム

```

Compute  $r^{(0)} = b - [A]x^{(0)}$ 
for  $i = 1, 2, \dots$ 
  solve  $[M]z^{(i-1)} = r^{(i-1)}$ 
   $\rho_{i-1} = r^{(i-1)} \cdot z^{(i-1)}$ 
  if  $i = 1$ 
     $p^{(1)} = z^{(0)}$ 
  else
     $\beta_{i-1} = \rho_{i-1} / \rho_{i-2}$ 
     $p^{(i)} = z^{(i-1)} + \beta_{i-1} p^{(i-1)}$ 
  endif
   $q^{(i)} = [A]p^{(i)}$ 
   $\alpha_i = \rho_{i-1} / p^{(i)} \cdot q^{(i)}$ 
   $x^{(i)} = x^{(i-1)} + \alpha_i p^{(i)}$ 
   $r^{(i)} = r^{(i-1)} - \alpha_i q^{(i)}$ 
  check convergence  $|r|$ 
end

```

$$[M] = [M_1][M_2]$$

$$[A']x' = b'$$

$$[A'] = [M_1]^{-1}[A][M_2]^{-1}$$

$$x' = [M_2]x, \quad b' = [M_1]^{-1}b$$

$$p' \Rightarrow [M_2]p, \quad r' \Rightarrow [M_1]^{-1}r$$

$$p'^{(i)} = r'^{(i-1)} + \beta'_{i-1} p'^{(i-1)}$$

$$[M_2]p^{(i)} = [M_1]^{-1}r^{(i-1)} + \beta'_{i-1} [M_2]p^{(i-1)}$$

$$p^{(i)} = [M_2]^{-1}[M_1]^{-1}r^{(i-1)} + \beta'_{i-1} p^{(i-1)}$$

$$p^{(i)} = [M]^{-1}r^{(i-1)} + \beta'_{i-1} p^{(i-1)}$$

$$\beta'_{i-1} = \frac{([M]^{-1}r^{(i-1)}, r^{(i-1)})}{([M]^{-1}r^{(i-2)}, r^{(i-2)})}$$

$$\alpha'_{i-1} = \frac{([M]^{-1}r^{(i-1)}, r^{(i-1)})}{(p^{(i-1)}, [A]p^{(i-1)})}$$

CG法では通常, $[M_2] = [M_1]^T$ である(例: 不完全コレスキー分解)
 従って $[M_1]$ と $[M_2]$ を以下のように定義する:

$$[M_1] = [X]^T, [M_2] = [X], [M] = [M_1][M_2]$$

$$[A']x' = b'$$

$$[A'] = [M_1]^{-1}[A][M_2]^{-1} = [[X]^T]^{-1}[A][X]^{-1} = [X]^{-T}[A][X]^{-1}$$

$$x' = [X]x, \quad b' = [X]^{-T}b, \quad r' = [X]^{-T}r$$

$$\begin{aligned} \alpha'_{i-1} &= \frac{(r^{(i-1)}, r^{(i-1)})}{(p^{(i-1)}, A' p^{(i-1)})} = \frac{([X]^{-T} r^{(i-1)}, [X]^{-T} r^{(i-1)})}{([X] p^{(i-1)}, [X]^{-T} [A][X]^{-1} [X] p^{(i-1)})} \\ &= \frac{\left(([X]^{-T} r^{(i-1)})^T, [X]^{-T} r^{(i-1)} \right)}{\left((r^{(i-1)})^T [X]^{-1}, [X^T]^{-1} r^{(i-1)} \right)} \\ &= \frac{\left(([X] p^{(i-1)})^T, [X]^{-T} [A] p^{(i-1)} \right)}{\left((p^{(i-1)})^T [X]^T, [X]^{-T} [A] p^{(i-1)} \right)} \\ &= \frac{\left(r^{(i-1)}, [[X^T][X]]^{-1} r^{(i-1)} \right)}{\left(p^{(i-1)}, [A] p^{(i-1)} \right)} = \frac{\left(r^{(i-1)}, [M]^{-1} r^{(i-1)} \right)}{\left(p^{(i-1)}, [A] p^{(i-1)} \right)} = \frac{\left(r^{(i-1)}, z^{(i-1)} \right)}{\left(p^{(i-1)}, [A] p^{(i-1)} \right)} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\beta'_{i-1} &= \frac{\left(r^{(i-1)}, r^{(i-1)} \right)}{\left(r^{(i-2)}, r^{(i-2)} \right)} = \frac{\left([\mathbf{X}]^{-T} r^{(i-1)}, [\mathbf{X}]^{-T} r^{(i-1)} \right)}{\left([\mathbf{X}]^{-T} r^{(i-2)}, [\mathbf{X}]^{-T} r^{(i-2)} \right)} \\
&= \frac{\left(\left([\mathbf{X}]^{-T} r^{(i-1)} \right)^T, [\mathbf{X}]^{-T} r^{(i-1)} \right)}{\left(\left([\mathbf{X}]^{-T} r^{(i-2)} \right)^T, [\mathbf{X}]^{-T} r^{(i-2)} \right)} = \frac{\left(\left(r^{(i-1)} \right)^T [\mathbf{X}]^{-1}, [\mathbf{X}^T]^{-1} r^{(i-1)} \right)}{\left(\left(r^{(i-2)} \right)^T [\mathbf{X}]^{-1}, [\mathbf{X}^T]^{-1} r^{(i-2)} \right)} \\
&= \frac{\left(r^{(i-1)}, \left[[\mathbf{X}^T] [\mathbf{X}] \right]^{-1} r^{(i-1)} \right)}{\left(r^{(i-2)}, \left[[\mathbf{X}^T] [\mathbf{X}] \right]^{-1} r^{(i-2)} \right)} = \frac{\left(r^{(i-1)}, [\mathbf{M}]^{-1} r^{(i-1)} \right)}{\left(r^{(i-2)}, [\mathbf{M}]^{-1} r^{(i-2)} \right)} = \frac{\left(r^{(i-1)}, \mathcal{Z}^{(i-1)} \right)}{\left(r^{(i-2)}, \mathcal{Z}^{(i-2)} \right)}
\end{aligned}$$

前処理付き共役勾配法

```

Compute  $r^{(0)} = b - [A]x^{(0)}$ 
for  $i = 1, 2, \dots$ 
  solve  $[M]z^{(i-1)} = r^{(i-1)}$ 
   $\rho_{i-1} = r^{(i-1)} \cdot z^{(i-1)}$ 
  if  $i = 1$ 
     $p^{(1)} = z^{(0)}$ 
  else
     $\beta_{i-1} = \rho_{i-1} / \rho_{i-2}$ 
     $p^{(i)} = z^{(i-1)} + \beta_{i-1} p^{(i-1)}$ 
  endif
   $q^{(i)} = [A]p^{(i)}$ 
   $\alpha_i = \rho_{i-1} / p^{(i)} \cdot q^{(i)}$ 
   $x^{(i)} = x^{(i-1)} + \alpha_i p^{(i)}$ 
   $r^{(i)} = r^{(i-1)} - \alpha_i q^{(i)}$ 
  check convergence  $|r|$ 
end

```

下記の方程式を解く:

$$\{z\} = [M]^{-1} \{r\}$$

近似逆行列

$$^x [M]^{-1} \approx [A]^{-1}, \quad [M] \approx [A]$$

究極の前処理: 本当の逆行列

$$[M]^{-1} = [A]^{-1}, \quad [M] = [A]$$

対角スケールリング: 簡単だが弱い

$$[M]^{-1} = [D]^{-1}, \quad [M] = [D]$$

ILU(0), IC(0)

- 最もよく使用されている前処理 (疎行列用)
 - 不完全LU分解
 - Incomplete LU Factorization
 - 不完全コレスキー分解
 - Incomplete Cholesky Factorization (対称行列)
- 不完全な直接法
 - もとの行列が疎でも, 逆行列は疎とは限らない。
 - fill-in
 - もとの行列と同じ非ゼロパターン (fill-in無し) を持っているのがILU(0), IC(0)

対角スケーリング, 点ヤコビ前処理

- 前処理行列として, もとの行列の対角成分のみを取り出した行列を前処理行列 $[M]$ とする。
 - 対角スケーリング, 点ヤコビ (point-Jacobi) 前処理

$$[M] = \begin{bmatrix} D_1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & D_2 & & 0 & 0 \\ \dots & & \dots & & \dots \\ 0 & 0 & & D_{N-1} & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & D_N \end{bmatrix}$$

- **solve** $[M] \mathbf{z}^{(i-1)} = \mathbf{r}^{(i-1)}$ という場合に逆行列を簡単に求めることができる。
- 簡単な問題では収束する。
- 1d.f, 1d.cはこの手法を使用している

- ガラーキン法による一次元弾性問題の解法
- 連立一次方程式の解法
 - 共役勾配法
 - 前処理手法
- 疎行列格納法
- プログラムの内容

1d.f, 1d.cにおけるマトリクス関連変数

変数名	型	サイズ	内容
N	I	-	未知数総数
NPLU	I	-	連立一次方程式係数マトリクス非対角成分総数
Diag(:)	R	N	連立一次方程式係数マトリクス対角成分
PHI(:)	R	N	連立一次方程式未知数ベクトル
Rhs(:)	R	N	連立一次方程式右辺ベクトル
Index(:)	I	0:N N+1	係数マトリクス非対角成分要素番号用一次元圧縮配列(非対角成分数)
Item(:)	I	NPLU	係数マトリクス非対角成分要素番号用一次元圧縮配列(非対角成分要素(列)番号)
AMat(:)	R	NPLU	係数マトリクス非対角成分要素番号用一次元圧縮配列(非対角成分)

非零非対角成分のみを格納する
Compressed Row Storage法を使用している。

行列ベクトル積への適用

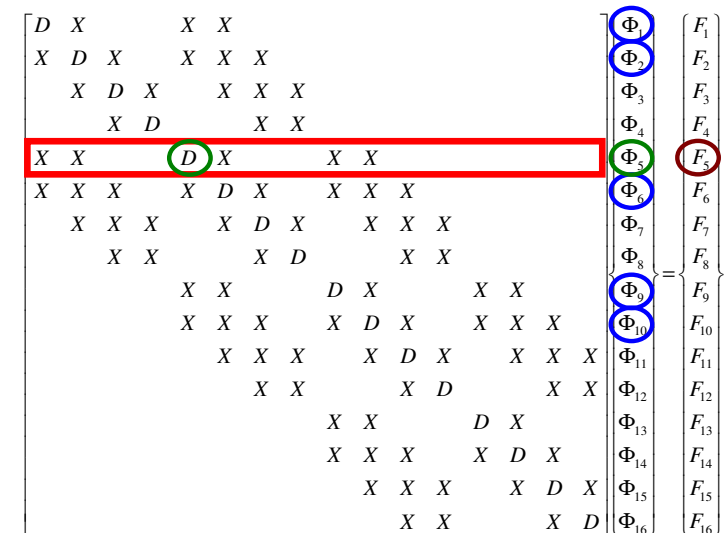
(非零)非対角成分のみを格納, 疎行列向け方法

Compressed Row Storage (CRS)

DIAG (i) 対角成分(実数, $i=1, N$)
 INDEX (i) 非対角成分に関する一次元配列
 (整数, $i=0, N$)
 ITEM (k) 非対角成分の要素(列)番号
 (整数, $k=1, \text{INDEX}(N)$)
 AMAT (k) 非対角成分
 (実数, $k=1, \text{INDEX}(N)$)

$$\{Y\} = [A] \{X\}$$

```
do i= 1, N
  Y(i) = D(i)*X(i)
  do k= INDEX(i-1)+1, INDEX(i)
    Y(i) = Y(i) + AMAT(k)*X(ITEM(k))
  enddo
enddo
```



行列ベクトル積：密行列⇒とても簡単

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1,N-1} & a_{1,N} \\ a_{21} & a_{22} & & a_{2,N-1} & a_{2,N} \\ \cdots & & \cdots & & \cdots \\ a_{N-1,1} & a_{N-1,2} & & a_{N-1,N-1} & a_{N-1,N} \\ a_{N,1} & a_{N,2} & \cdots & a_{N,N-1} & a_{N,N} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_{N-1} \\ x_N \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_{N-1} \\ y_N \end{Bmatrix}$$

$$\{Y\} = [A] \{X\}$$

```
do j= 1, N
  Y(j) = 0. d0
  do i= 1, N
    Y(j) = Y(j) + A(i, j)*X(i)
  enddo
enddo
```

Compressed Row Storage (CRS)

	①	②	③	④	⑤	⑥	⑦	⑧
①	1.1	2.4	0	0	3.2	0	0	0
②	4.3	3.6	0	2.5	0	3.7	0	9.1
③	0	0	5.7	0	1.5	0	3.1	0
④	0	4.1	0	9.8	2.5	2.7	0	0
⑤	3.1	9.5	10.4	0	11.5	0	4.3	0
⑥	0	0	6.5	0	0	12.4	9.5	0
⑦	0	6.4	2.5	0	0	1.4	23.1	13.1
⑧	0	9.5	1.3	9.6	0	3.1	0	51.3

Compressed Row Storage (CRS)

Fortranの場合, Cでは0番から番号付け

	①	②	③	④	⑤	⑥	⑦	⑧
①	1.1 ①	2.4 ②			3.2 ⑤			
②	4.3 ①	3.6 ②		2.5 ④		3.7 ⑥		9.1 ⑧
③			5.7 ③		1.5 ⑤		3.1 ⑦	
④		4.1 ②		9.8 ④	2.5 ⑤	2.7 ⑥		
⑤	3.1 ①	9.5 ②	10.4 ③		11.5 ⑤		4.3 ⑦	
⑥			6.5 ③			12.4 ⑥	9.5 ⑦	
⑦		6.4 ②	2.5 ③			1.4 ⑥	23.1 ⑦	13.1 ⑧
⑧		9.5 ②	1.3 ③	9.6 ④		3.1 ⑥		51.3 ⑧

N= 8

対角成分

$$\text{Diag}(1) = 1.1$$

$$\text{Diag}(2) = 3.6$$

$$\text{Diag}(3) = 5.7$$

$$\text{Diag}(4) = 9.8$$

$$\text{Diag}(5) = 11.5$$

$$\text{Diag}(6) = 12.4$$

$$\text{Diag}(7) = 23.1$$

$$\text{Diag}(8) = 51.3$$

Compressed Row Storage (CRS)

	①	②	③	④	⑤	⑥	⑦	⑧
①	1.1 ①		2.4 ②			3.2 ⑤		
②	3.6 ②	4.3 ①			2.5 ④		3.7 ⑥	9.1 ⑧
③	5.7 ③					1.5 ⑤		3.1 ⑦
④	9.8 ④		4.1 ②			2.5 ⑤	2.7 ⑥	
⑤	11.5 ⑤	3.1 ①	9.5 ②	10.4 ③				4.3 ⑦
⑥	12.4 ⑥			6.5 ③				9.5 ⑦
⑦	23.1 ⑦		6.4 ②	2.5 ③			1.4 ⑥	13.1 ⑧
⑧	51.3 ⑧		9.5 ②	1.3 ③	9.6 ④		3.1 ⑥	

Compressed Row Storage (CRS)

	非対角成分						
①	1.1 ①	2.4 ②	3.2 ⑤			2	$\text{index}(0) = 0$
②	3.6 ②	4.3 ①	2.5 ④	3.7 ⑥	9.1 ⑧	4	$\text{index}(1) = 2$
③	5.7 ③	1.5 ⑤	3.1 ⑦			2	$\text{index}(2) = 6$
④	9.8 ④	4.1 ②	2.5 ⑤	2.7 ⑥		3	$\text{index}(3) = 8$
⑤	11.5 ⑤	3.1 ①	9.5 ②	10.4 ③	4.3 ⑦	4	$\text{index}(4) = 11$
⑥	12.4 ⑥	6.5 ③	9.5 ⑦			2	$\text{index}(5) = 15$
⑦	23.1 ⑦	6.4 ②	2.5 ③	1.4 ⑥	13.1 ⑧	4	$\text{index}(6) = 17$
⑧	51.3 ⑧	9.5 ②	1.3 ③	9.6 ④	3.1 ⑥	4	$\text{index}(7) = 21$
							$\text{index}(8) = 25$

NPLU= 25
(=index(N))

$\text{index}(i-1)+1 \sim \text{index}(i)$ 番目が i 行目の非対角成分

Compressed Row Storage (CRS)

	非対角成分						
①	1.1 ①	2.4 ②,1	3.2 ⑤,2			2	$\text{index}(0) = 0$
②	3.6 ②	4.3 ①,3	2.5 ④,4	3.7 ⑥,5	9.1 ⑧,6	4	$\text{index}(1) = 2$
③	5.7 ③	1.5 ⑤,7	3.1 ⑦,8			2	<u>$\text{index}(2) = 6$</u>
④	9.8 ④	4.1 ②,9	2.5 ⑤,10	2.7 ⑥,11		3	<u>$\text{index}(3) = 8$</u>
⑤	11.5 ⑤	3.1 ①,12	9.5 ②,13	10.4 ③,14	4.3 ⑦,15	4	<u>$\text{index}(4) = 11$</u>
⑥	12.4 ⑥	6.5 ③,16	9.5 ⑦,17			2	$\text{index}(5) = 15$
⑦	23.1 ⑦	6.4 ②,18	2.5 ③,19	1.4 ⑥,20	13.1 ⑧,21	4	$\text{index}(6) = 17$
⑧	51.3 ⑧	9.5 ②,22	1.3 ③,23	9.6 ④,24	3.1 ⑥,25	4	$\text{index}(7) = 21$
							$\text{index}(8) = 25$

NPLU= 25
(=index(N))

$\text{index}(i-1)+1 \sim \text{index}(i)$ 番目が i 行目の非対角成分

Compressed Row Storage (CRS)

1	1.1 ①	2.4 ②,1	3.2 ⑤,2		
2	3.6 ②	4.3 ①,3	2.5 ④,4	3.7 ⑥,5	9.1 ⑧,6
3	5.7 ③	1.5 ⑤,7	3.1 ⑦,8		
4	9.8 ④	4.1 ②,9	2.5 ⑤,10	2.7 ⑥,11	
5	11.5 ⑤	3.1 ①,12	9.5 ②,13	10.4 ③,14	4.3 ⑦,15
6	12.4 ⑥	6.5 ③,16	9.5 ⑦,17		
7	23.1 ⑦	6.4 ②,18	2.5 ③,19	1.4 ⑥,20	13.1 ⑧,21
8	51.3 ⑧	9.5 ②,22	1.3 ③,23	9.6 ④,24	3.1 ⑥,25

例:

`item(7) = 5, AMAT(7) = 1.5`

`item(19) = 3, AMAT(19) = 2.5`

Compressed Row Storage (CRS)

1	1.1 ①	2.4 ②,1	3.2 ⑤,2		
2	3.6 ②	4.3 ①,3	2.5 ④,4	3.7 ⑥,5	9.1 ⑧,6
3	5.7 ③	1.5 ⑤,7	3.1 ⑦,8		
4	9.8 ④	4.1 ②,9	2.5 ⑤,10	2.7 ⑥,11	
5	11.5 ⑤	3.1 ①,12	9.5 ②,13	10.4 ③,14	4.3 ⑦,15
6	12.4 ⑥	6.5 ③,16	9.5 ⑦,17		
7	23.1 ⑦	6.4 ②,18	2.5 ③,19	1.4 ⑥,20	13.1 ⑧,21
8	51.3 ⑧	9.5 ②,22	1.3 ③,23	9.6 ④,24	3.1 ⑥,25

$D(i)$ 対角成分(実数, $i=1, N$)
 $index(i)$ 非対角成分に関する一次元配列
 (通し番号)(整数, $i=0, N$)
 $item(k)$ 非対角成分の要素(列)番号
 (整数, $k=1, index(N)$)
 $AMAT(k)$ 非対角成分
 (実数, $k=1, index(N)$)

$$\{Y\} = [A] \{X\}$$

```

do i= 1, N
  Y(i)= D(i)*X(i)
  do k= index(i-1)+1, index(i)
    Y(i)= Y(i) + AMAT(k)*X(item(k))
  enddo
enddo
  
```

- ガラーキン法による一次元弾性問題の解法
- 連立一次方程式の解法
 - 共役勾配法
 - 前処理手法
- 疎行列格納法
- プログラムの内容

有限要素法の処理: プログラム

- 初期化
 - 制御変数読み込み
 - 座標読み込み⇒要素生成 (N:節点数, NE:要素数)
 - 配列初期化 (全体マトリクス, 要素マトリクス)
 - 要素⇒全体マトリクスマッピング (Index, Item)
- マトリクス生成
 - 要素単位の処理 (do icel= 1, NE)
 - 要素マトリクス計算
 - 全体マトリクスへの重ね合わせ
 - 境界条件の処理
- 連立一次方程式
 - 共役勾配法 (CG)

プログラム: 1d.f(1/6)

諸変数

```
!C
!C 1D Steady-State Heat Transfer
!C FEM with Piece-wise Linear Elements
!C CG (Conjugate Gradient) Method
!C
!C  $d/dx(CdT/dx) + Q = 0$ 
!C  $T=0@x=0$ 
!C
program heat1D
implicit REAL*8 (A-H, O-Z)

integer :: N, NPLU, ITERmax
integer :: R, Z, P, Q, DD

real(kind=8) :: dX, RESID, EPS
real(kind=8) :: AREA, QV, COND
real(kind=8), dimension(:), allocatable :: PHI, RHS, X
real(kind=8), dimension(:), allocatable :: DIAG, AMAT
real(kind=8), dimension(:, :), allocatable :: W

real(kind=8), dimension(2, 2) :: KMAT, EMAT

integer, dimension(:), allocatable :: ICELNOD
integer, dimension(:), allocatable :: INDEX, ITEM
```

変数表 (1/2)

変数名	種別	サイズ	I/O	内 容
NE	I		I	要素数
N	I		O	節点数
NPLU	I		O	非零非対角成分数
IterMax	I		I	最大反復回数
R, Z, Q, P, DD	I		O	CG法ベクトル名
dX	R		I	要素長さ
RESID	R		O	CG法残差
EPS	R		I	CG法反復打ち切り残差
AREA	R		I	要素断面積
QV	R		I	体積当たり発熱量 \dot{Q}
COND	R		I	熱伝導率

変数表 (2/2)

変数名	種別	サイズ	I/O	内 容
X	R	N	O	節点座標
PHI	R	N	O	節点温度
RHS	R	N	O	右辺ベクトル
DIAG	R	N	O	全体マトリクス：対角成分
W	R	N, 4	O	CG法のwork配列
AMAT	R	NPLU	O	全体マトリクス：非零非対角成分
INDEX	I	0:N	O	全体マトリクス：各行の非零非対角成分数
ITEM	I	NPLU	O	全体マトリクス：列番号
ICELNOD	I	2*NE	O	各要素節点番号
KMAT	R	2, 2	O	要素マトリクス[k]
EMAT	R	2, 2	O	要素マトリクス

プログラム: 1d.f(2/6)

初期設定, 配列宣言

```
!C
!C +-----+
!C | INIT. |
!C +-----+
!C===
```

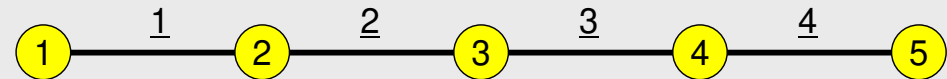
```
open (11, file='input.dat', status='unknown')
read (11,*) NE
read (11,*) dX, QV, AREA, COND
read (11,*) ITERmax
read (11,*) EPS
close (11)
```

制御ファイル input.dat

4	NE (要素数)
1.0 1.0 1.0 1.0	Δx (要素長さL) Q, A, COND
100	反復回数
1.e-8	CG法の反復打切誤差

```
N= NE + 1
allocate (PHI(N), DIAG(N), AMAT(2*N-2), RHS(N))
allocate (ICELNOD(2*NE), X(N))
allocate (INDEX(0:N), ITEM(2*N-2), W(N,4))
```

```
PHI = 0. d0
AMAT= 0. d0
DIAG= 0. d0
RHS= 0. d0
X= 0. d0
```



NE : 要素数
N : 節点数 (=NE+1)

プログラム: 1d.f(2/6)

初期設定, 配列宣言

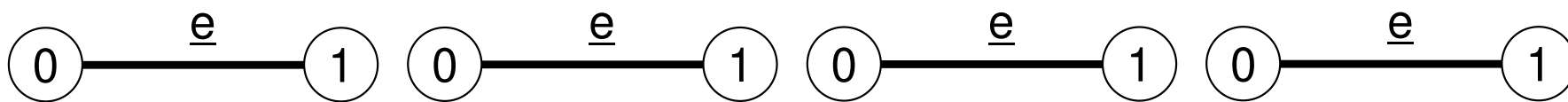
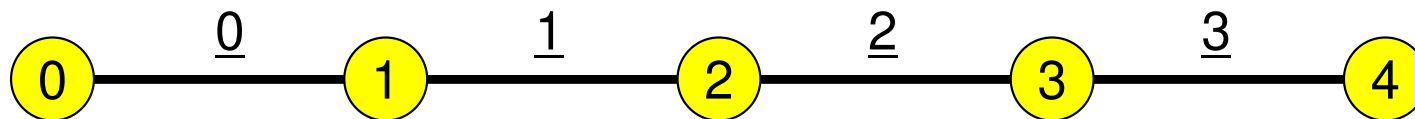
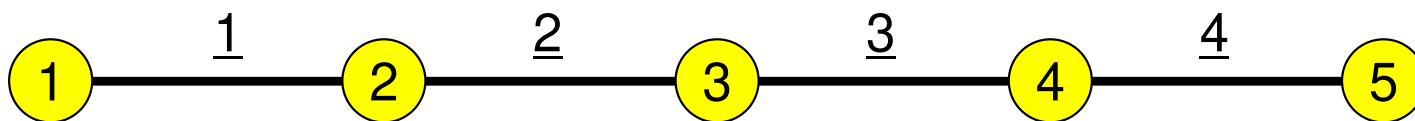
```
!C
!C +-----+
!C | INIT. |
!C +-----+
!C===
      open (11, file='input.dat', status='unknown')
      read (11,*) NE
      read (11,*) dX, QV, AREA, COND
      read (11,*) ITERmax
      read (11,*) EPS
      close (11)

      N= NE + 1
      allocate (PHI(N), DIAG(N), AMAT(2*N-2), RHS(N))
      allocate (ICELNOD(2*NE), X(N))
      allocate (INDEX(0:N), ITEM(2*N-2), W(N,4))

      PHI = 0. d0
      AMAT= 0. d0
      DIAG= 0. d0
      RHS= 0. d0
      X= 0. d0
```

Amat : 非零非対角成分
Item : 対応する列番号

注意：プログラムの中では節点・要素番号は0からふられている（C言語）



プログラム: 1d.f(2/6)

初期設定, 配列宣言

```

!C
!C +-----+
!C |  INIT.  |
!C +-----+
!C====
open  (11, file='input.dat', status='unknown')
read  (11,*) NE
read  (11,*) dX, QV, AREA, COND
read  (11,*) ITERmax
read  (11,*) EPS
close (11)

```

```

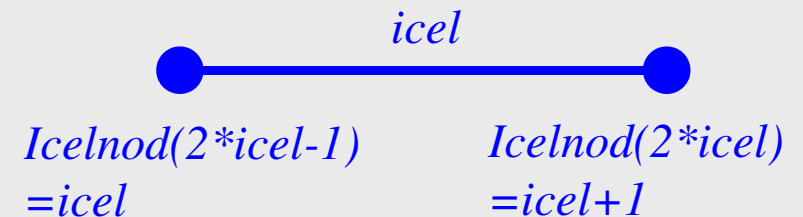
N= NE + 1
allocate (PHI(N), DIAG(N), AMAT(2*N-2), RHS(N))
allocate (ICELNOD(2*NE), X(N))
allocate (INDEX(0:N), ITEM(2*N-2), W(N,4))

```

```

PHI = 0. d0
AMAT= 0. d0
DIAG= 0. d0
RHS= 0. d0
X= 0. d0

```



Amat : 非零非対角成分
Item : 対応する列番号

各節点の非零非対角成分数は「2」
(ただし両端では「1」)

総数 : $2*(N-2)+1+1 = 2*N-2$

プログラム: 1d.f(3/6)

配列宣言(続き), 初期化

```
do i= 1, N
  X(i)= dfloat(i-1)*dX
enddo
```

X : 各節点の座標

```
do icel= 1, NE
  ICELNOD(2*icel-1)= icel
  ICELNOD(2*icel )= icel + 1
enddo
```

```
KMAT(1, 1)= +1. d0
KMAT(1, 2)= -1. d0
KMAT(2, 1)= -1. d0
KMAT(2, 2)= +1. d0
```

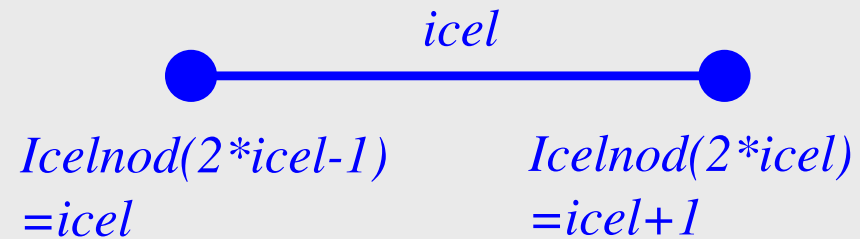
プログラム: 1d.f(3/6)

配列宣言(続き), 初期化

```
do i= 1, N
  X(i)= dfloat(i-1)*dX
enddo
```

```
do icel= 1, NE
  ICELNOD(2*icel-1)= icel
  ICELNOD(2*icel )= icel + 1
enddo
```

```
KMAT (1, 1)= +1. d0
KMAT (1, 2)= -1. d0
KMAT (2, 1)= -1. d0
KMAT (2, 2)= +1. d0
```



プログラム: 1d.f(3/6)

配列宣言(続き), 初期化

```
do i= 1, N
  X(i)= dfloat(i-1)*dX
enddo
```

```
do icel= 1, NE
  ICELNOD(2*icel-1)= icel
  ICELNOD(2*icel )= icel + 1
enddo
```

```
KMAT (1, 1)= +1. d0
KMAT (1, 2)= -1. d0
KMAT (2, 1)= -1. d0
KMAT (2, 2)= +1. d0
```

$$[k]^{(e)} = \int_V \lambda \left(\frac{d[N]^T}{dx} \frac{d[N]}{dx} \right) dV = \frac{\lambda A}{L} \begin{bmatrix} +1 & -1 \\ -1 & +1 \end{bmatrix}$$

[Kmat]

プログラム: 1d.f(4/6)

全体マトリクス: 非零非対角成分に対応する列番号

```
!C
!C +-----+
!C | CONNECTIVITY |
!C +-----+
!C==
```

INDEX = 2

INDEX(0) = 0

INDEX(1) = 1

INDEX(N) = 1

```
do i= 1, N
  INDEX(i) = INDEX(i) + INDEX(i-1)
enddo
```

NPLU = INDEX(N)

```
do i= 1, N
  jS = INDEX(i-1)
  if (i.eq.1) then
    ITEM(jS+1) = i+1
  else if
& (i.eq.N) then
    ITEM(jS+1) = i-1
  else
    ITEM(jS+1) = i-1
    ITEM(jS+2) = i+1
  endif
enddo
```

```
!C==
```

各節点の非零非対角成分数は「2」
(ただし両端では「1」)

総数: $2*(N-2)+1+1 = 2*N-2$

INDEX(N) = $2*N-2 = NPLU$

非対角
成分数

index(0) = 0

index(1) = 2

index(2) = 6

index(3) = 8

index(4) = 11

index(5) = 15

index(6) = 17

index(7) = 21

index(8) = 25

1	1.1 ①	2.4 ②,1	3.2 ⑤,2		2	
2	3.6 ②	4.3 ①,3	2.5 ④,4	3.7 ⑥,5	9.1 ⑧,6	4
3	5.7 ③	1.5 ⑤,7	3.1 ⑦,8			2
4	9.8 ④	4.1 ②,9	2.5 ⑤,10	2.7 ⑥,11		3
5	11.5 ⑤	3.1 ①,12	9.5 ②,13	10.4 ③,14	4.3 ⑦,15	4
6	12.4 ⑥	6.5 ③,16	9.5 ⑦,17			2
7	23.1 ⑦	6.4 ②,18	2.5 ③,19	1.4 ⑥,20	13.1 ⑧,21	4
8	51.3 ⑧	9.5 ②,22	1.3 ③,23	9.6 ④,24	3.1 ⑥,25	4

index(i-1)+1~index(i) 番目がi行目の非対角成分

プログラム: 1d.f(4/6)

全体マトリクス: 非零非対角成分に対応する列番号

```
!C
!C +-----+
!C | CONNECTIVITY |
!C +-----+
!C ==
```

```
INDEX = 2
```

```
INDEX(0) = 0
```

```
INDEX(1) = 1
```

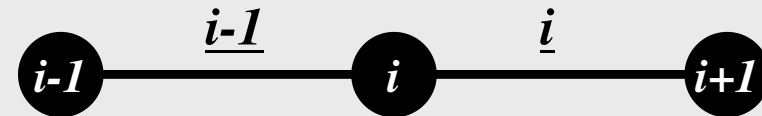
```
INDEX(N) = 1
```

```
do i= 1, N
  INDEX(i) = INDEX(i) + INDEX(i-1)
enddo
```

```
NPLU= INDEX(N)
```

```
do i= 1, N
  jS= INDEX(i-1)
  if (i.eq.1) then
    ITEM(jS+1)= i+1
  else if
& (i.eq.N) then
    ITEM(jS+1)= i-1
  else
    ITEM(jS+1)= i-1
    ITEM(jS+2)= i+1
  endif
enddo
```

```
!C==
```



Node	Value	Non-zero off-diagonal components (row, column)	Number of components	Index
1	1.1	(1,2), (5,2)	2	index(0) = 0
2	3.6	(1,3), (4,4), (6,5), (8,6)	4	index(1) = 2
3	5.7	(5,7), (7,8)	2	index(2) = 6
4	9.8	(2,9), (5,10), (6,11)	3	<u>index(3) = 8</u>
5	11.5	(1,12), (2,13), (3,14), (7,15)	4	<u>index(4) = 11</u>
6	12.4	(3,16), (7,17)	2	index(5) = 15
7	23.1	(2,18), (3,19), (6,20), (8,21)	4	index(6) = 17
8	51.3	(2,22), (3,23), (4,24), (6,25)	4	index(7) = 21
				index(8) = 25

index(i-1)+1~index(i) 番目がi行目の非対角成分

プログラム: 1d.f(5/6)

全体マトリクス生成: 要素マトリクス⇒全体マトリクス

```

!C +-----+
!C | MATRIX ASSEMBLE |
!C +-----+
!C===
do icel= 1, NE
  in1= ICELNOD(2*icel-1)
  in2= ICELNOD(2*icel )
  X1 = X(in1)
  X2 = X(in2)
  DL = dabs(X2-X1)

  cK= AREA*COND/DL
  EMAT(1, 1)= Ck*KMAT(1, 1)
  EMAT(1, 2)= Ck*KMAT(1, 2)
  EMAT(2, 1)= Ck*KMAT(2, 1)
  EMAT(2, 2)= Ck*KMAT(2, 2)

  DIAG(in1)= DIAG(in1) + EMAT(1, 1)
  DIAG(in2)= DIAG(in2) + EMAT(2, 2)

  if (icel.eq.1) then
    k1= INDEX(in1-1) + 1
  else
    k1= INDEX(in1-1) + 2
  endif
  k2= INDEX(in2-1) + 1

  AMAT(k1)= AMAT(k1) + EMAT(1, 2)
  AMAT(k2)= AMAT(k2) + EMAT(2, 1)

  QN= 0.50d0*QV*AREA*DL
  RHS(in1)= RHS(in1) + QN
  RHS(in2)= RHS(in2) + QN
enddo
!C===

```



プログラム: 1d.f(5/6)

全体マトリクス生成: 要素マトリクス⇒全体マトリクス

```
!C +-----+
!C | MATRIX ASSEMBLE |
!C +-----+
!C===
```

```
do icel= 1, NE
  in1= ICELNOD(2*icel-1)
  in2= ICELNOD(2*icel )
  X1 = X(in1)
  X2 = X(in2)
  DL = dabs(X2-X1)
```

```
cK= AREA*COND/DL
EMAT(1,1)= Ck*KMAT(1,1)
EMAT(1,2)= Ck*KMAT(1,2)
EMAT(2,1)= Ck*KMAT(2,1)
EMAT(2,2)= Ck*KMAT(2,2)
```

```
DIAG(in1)= DIAG(in1) + EMAT(1,1)
DIAG(in2)= DIAG(in2) + EMAT(2,2)
```

```
if (icel.eq.1) then
  k1= INDEX(in1-1) + 1
else
  k1= INDEX(in1-1) + 2
endif
k2= INDEX(in2-1) + 1
```

```
AMAT(k1)= AMAT(k1) + EMAT(1,2)
AMAT(k2)= AMAT(k2) + EMAT(2,1)
```

```
QN= 0.50d0*QV*AREA*DL
RHS(in1)= RHS(in1) + QN
RHS(in2)= RHS(in2) + QN
```

```
enddo
```

```
!C===
```



$$[Emat] = [k]^{(e)} = \frac{\lambda A}{L} \begin{bmatrix} +1 & -1 \\ -1 & +1 \end{bmatrix} = \frac{\lambda A}{L} [Kmat]$$

プログラム: 1d.f(5/6)

全体マトリクス生成: 要素マトリクス⇒全体マトリクス

```

!C +-----+
!C | MATRIX ASSEMBLE |
!C +-----+
!C===
do icel= 1, NE
  in1= ICELNOD(2*icel-1)
  in2= ICELNOD(2*icel )
  X1 = X(in1)
  X2 = X(in2)
  DL = dabs(X2-X1)

  cK= AREA*COND/DL
  EMAT (1, 1)= Ck*KMAT (1, 1)
  EMAT (1, 2)= Ck*KMAT (1, 2)
  EMAT (2, 1)= Ck*KMAT (2, 1)
  EMAT (2, 2)= Ck*KMAT (2, 2)

  DIAG(in1)= DIAG(in1) + EMAT (1, 1)
  DIAG(in2)= DIAG(in2) + EMAT (2, 2)

  if (icel.eq.1) then
    k1= INDEX(in1-1) + 1
  else
    k1= INDEX(in1-1) + 2
  endif
  k2= INDEX(in2-1) + 1

  AMAT (k1)= AMAT (k1) + EMAT (1, 2)
  AMAT (k2)= AMAT (k2) + EMAT (2, 1)

  QN= 0.50d0*QV*AREA*DL
  RHS (in1)= RHS (in1) + QN
  RHS (in2)= RHS (in2) + QN
enddo
!C===

```



$$[Emat] = [k]^{(e)} = \frac{EA}{L} \begin{bmatrix} +1 & -1 \\ -1 & +1 \end{bmatrix}$$

プログラム: 1d.f(5/6)

全体マトリクス生成: 要素マトリクス ⇒ 全体マトリクス

```

!C +-----+
!C | MATRIX ASSEMBLE |
!C +-----+
!C===
do icel= 1, NE
  in1= ICELNOD(2*icel-1)
  in2= ICELNOD(2*icel )
  X1 = X(in1)
  X2 = X(in2)
  DL = dabs(X2-X1)

  cK= AREA*COND/DL
  EMAT(1,1)= Ck*KMAT(1,1)
  EMAT(1,2)= Ck*KMAT(1,2)
  EMAT(2,1)= Ck*KMAT(2,1)
  EMAT(2,2)= Ck*KMAT(2,2)

  DIAG(in1)= DIAG(in1) + EMAT(1,1)
  DIAG(in2)= DIAG(in2) + EMAT(2,2)

  if (icel.eq.1) then
    k1= INDEX(in1-1) + 1
  else
    k1= INDEX(in1-1) + 2
  endif
  k2= INDEX(in2-1) + 1

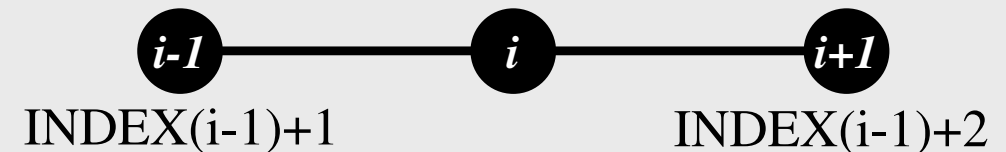
  AMAT(k1)= AMAT(k1) + EMAT(1,2)
  AMAT(k2)= AMAT(k2) + EMAT(2,1)

  QN= 0.50d0*QV*AREA*DL
  RHS(in1)= RHS(in1) + QN
  RHS(in2)= RHS(in2) + QN
enddo
!C===

```



「i」行の非対角成分：
INDEX(i-1)+1, INDEX(i-1)+2



$$[Emat] = [k]^{(e)} = \frac{\lambda A}{L} \begin{bmatrix} +1 & \ominus 1 \\ \ominus 1 & +1 \end{bmatrix} \begin{matrix} k1 \\ k2 \end{matrix}$$

通常の要素:k1

in1の非対角成分としてのin2

```

!C +-----+
!C | MATRIX ASSEMBLE |
!C +-----+
!C===
do icel= 1, NE
  in1= ICELNOD(2*icel-1)
  in2= ICELNOD(2*icel )
  X1 = X(in1)
  X2 = X(in2)
  DL = dabs(X2-X1)

  cK= AREA*COND/DL
  EMAT(1,1)= Ck*KMAT(1,1)
  EMAT(1,2)= Ck*KMAT(1,2)
  EMAT(2,1)= Ck*KMAT(2,1)
  EMAT(2,2)= Ck*KMAT(2,2)

  DIAG(in1)= DIAG(in1) + EMAT(1,1)
  DIAG(in2)= DIAG(in2) + EMAT(2,2)

  if (icel.eq.1) then
    k1= INDEX(in1-1) + 1
  else
    k1= INDEX(in1-1) + 2
  endif
  k2= INDEX(in2-1) + 1

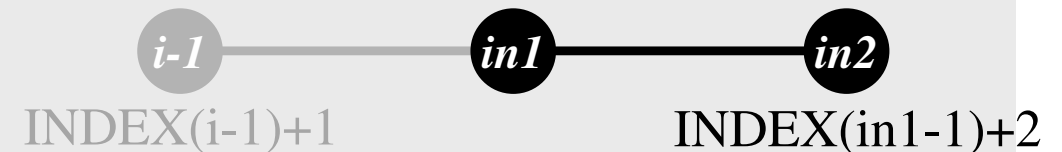
  AMAT(k1)= AMAT(k1) + EMAT(1,2)
  AMAT(k2)= AMAT(k2) + EMAT(2,1)

  QN= 0.50d0*QV*AREA*DL
  RHS(in1)= RHS(in1) + QN
  RHS(in2)= RHS(in2) + QN
enddo
!C===

```



「i」行の非対角成分：
INDEX(i-1)+1, INDEX(i-1)+2



$$[Emat] = [k]^{(e)} = \frac{\lambda A}{L} \begin{bmatrix} +1 & \ominus -1 \\ -1 & +1 \end{bmatrix} \quad k1$$

通常の要素:k2

in2の非対角成分としてのin1

```

!C +-----+
!C | MATRIX ASSEMBLE |
!C +-----+
!C===
do icel= 1, NE
  in1= ICELNOD(2*icel-1)
  in2= ICELNOD(2*icel )
  X1 = X(in1)
  X2 = X(in2)
  DL = dabs(X2-X1)

  cK= AREA*COND/DL
  EMAT(1,1)= Ck*KMAT(1,1)
  EMAT(1,2)= Ck*KMAT(1,2)
  EMAT(2,1)= Ck*KMAT(2,1)
  EMAT(2,2)= Ck*KMAT(2,2)

  DIAG(in1)= DIAG(in1) + EMAT(1,1)
  DIAG(in2)= DIAG(in2) + EMAT(2,2)

  if (icel.eq.1) then
    k1= INDEX(in1-1) + 1
  else
    k1= INDEX(in1-1) + 2
  endif
  k2= INDEX(in2-1) + 1

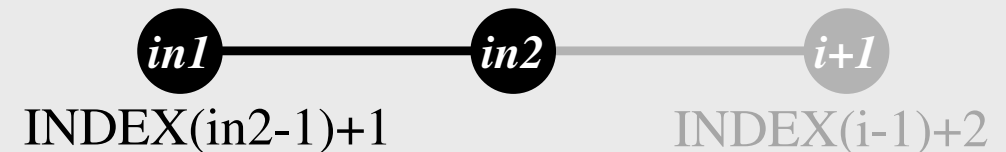
  AMAT(k1)= AMAT(k1) + EMAT(1,2)
  AMAT(k2)= AMAT(k2) + EMAT(2,1)

  QN= 0.50d0*QV*AREA*DL
  RHS(in1)= RHS(in1) + QN
  RHS(in2)= RHS(in2) + QN
enddo
!C===

```



「i」行の非対角成分：
INDEX(i-1)+1, INDEX(i-1)+2



$$[Emat] = [k]^{(e)} = \frac{\lambda A}{L} \begin{bmatrix} +1 & -1 \\ \ominus 1 & +1 \end{bmatrix}$$

k2

1番要素(左端): k1

in1の非対角成分としてのin2

```

!C +-----+
!C | MATRIX ASSEMBLE |
!C +-----+
!C===
do icel= 1, NE
  in1= ICELNOD(2*icel-1)
  in2= ICELNOD(2*icel )
  X1 = X(in1)
  X2 = X(in2)
  DL = dabs(X2-X1)

  cK= AREA*COND/DL
  EMAT(1, 1)= Ck*KMAT(1, 1)
  EMAT(1, 2)= Ck*KMAT(1, 2)
  EMAT(2, 1)= Ck*KMAT(2, 1)
  EMAT(2, 2)= Ck*KMAT(2, 2)

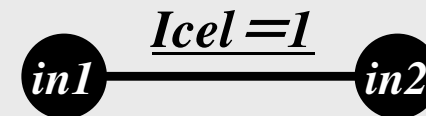
  DIAG(in1)= DIAG(in1) + EMAT(1, 1)
  DIAG(in2)= DIAG(in2) + EMAT(2, 2)

  if (icel.eq.1) then
    k1= INDEX(in1-1) + 1
  else
    k1= INDEX(in1-1) + 2
  endif
  k2= INDEX(in2-1) + 1

  AMAT(k1)= AMAT(k1) + EMAT(1, 2)
  AMAT(k2)= AMAT(k2) + EMAT(2, 1)

  QN= 0.50d0*QV*AREA*DL
  RHS(in1)= RHS(in1) + QN
  RHS(in2)= RHS(in2) + QN
enddo
!C===

```



「i」行の非対角成分：
INDEX[i-1]+1のみ



$$[Emat] = [k]^{(e)} = \frac{\lambda A}{L} \begin{bmatrix} +1 & \ominus -1 \\ -1 & +1 \end{bmatrix} \quad k1$$

プログラム: 1d.f(5/6)

体積発熱項, 右辺

```

!C +-----+
!C | MATRIX ASSEMBLE |
!C +-----+
!C===
do icel= 1, NE
  in1= ICELNOD(2*icel-1)
  in2= ICELNOD(2*icel )
  X1 = X(in1)
  X2 = X(in2)
  DL = dabs(X2-X1)

  cK= AREA*COND/DL
  EMAT(1, 1)= Ck*KMAT(1, 1)
  EMAT(1, 2)= Ck*KMAT(1, 2)
  EMAT(2, 1)= Ck*KMAT(2, 1)
  EMAT(2, 2)= Ck*KMAT(2, 2)

  DIAG(in1)= DIAG(in1) + EMAT(1, 1)
  DIAG(in2)= DIAG(in2) + EMAT(2, 2)

  if (icel.eq.1) then
    k1= INDEX(in1-1) + 1
  else
    k1= INDEX(in1-1) + 2
  endif
  k2= INDEX(in2-1) + 1

  AMAT(k1)= AMAT(k1) + EMAT(1, 2)
  AMAT(k2)= AMAT(k2) + EMAT(2, 1)

  QN= 0.50d0*QV*AREA*DL
  RHS(in1)= RHS(in1) + QN
  RHS(in2)= RHS(in2) + QN
enddo
!C===

```



$$\int_V \dot{Q}[N]^T dV = \dot{Q}A \int_0^L \begin{bmatrix} 1-x/L \\ x/L \end{bmatrix} dx = \frac{\dot{Q}AL}{2} \begin{Bmatrix} 1 \\ 1 \end{Bmatrix}$$

プログラム: 1d.f(6/6)

第一種境界条件@x=0

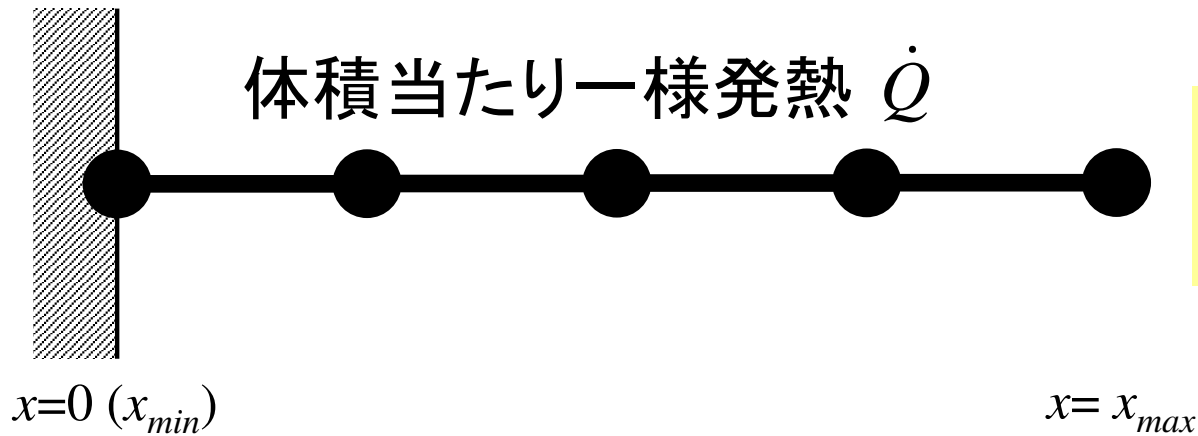
```
!C
!C +-----+
!C | BOUNDARY CONDITIONS |
!C +-----+
!C===

!C
!C-- X=Xmin
      i= 1
      jS= INDEX(i-1)

      AMAT(jS+1)= 0. d0
      DIAG(i)= 1. d0
      RHS (i)= 0. d0

      do k= 1, NPLU
        if (ITEM(k).eq. 1) AMAT(k)= 0. d0
      enddo
!C===
```

対象とする問題：一次元熱伝導問題

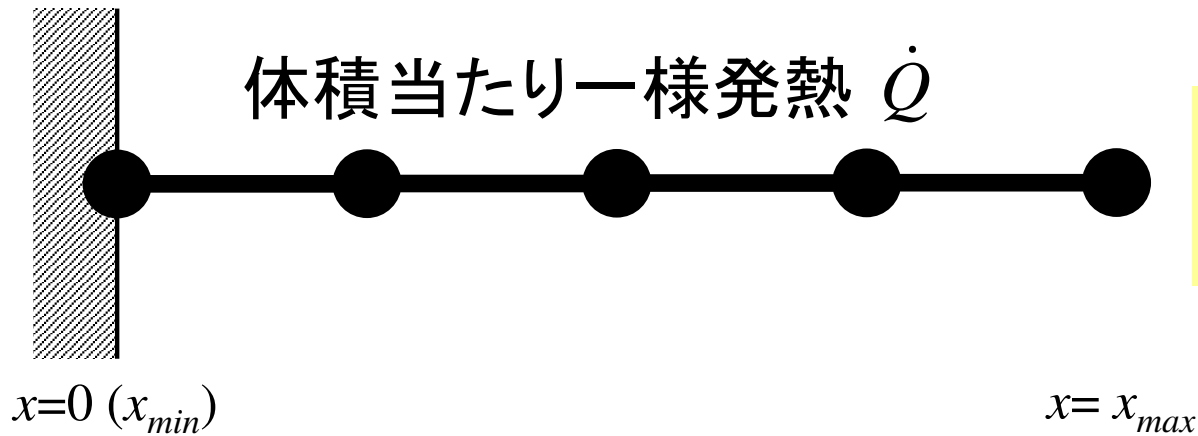


$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \dot{Q} = 0$$

- 一様な：断面積 A ，熱伝導率 λ
- 体積当たり一様発熱（時間当たり） $[QL^{-3}T^{-1}]$ \dot{Q}
- 境界条件
 - $x=0$: $T=0$ （固定）
 - $x=x_{max}$: $\frac{\partial T}{\partial x} = 0$ （断熱）

$x=0$ で成立する方程式

$$T_1=0$$



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

- 一様な：断面積 A ，熱伝導率 λ
- 体積当たり一様発熱（時間当たり） $[QL^{-3}T^{-1}]$ \dot{Q}
- 境界条件
 - $x=0$: $T=0$ （固定）
 -
 - $x=x_{max}$: $\frac{\partial T}{\partial x} = 0$ （断熱）

プログラム: 1d.f(6/6)

第一種境界条件@x=0

```

!C
!C +-----+
!C | BOUNDARY CONDITIONS |
!C +-----+
!C===

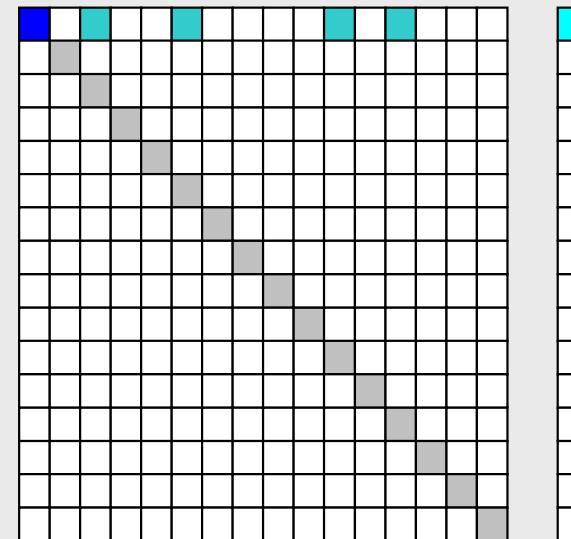
!C
!C-- X=Xmin
    i= 1
    js= INDEX(i-1)

    AMAT(js+1)= 0. d0
    DIAG(i)= 1. d0
    RHS (i)= 0. d0

    do k= 1, NPLU
        if (ITEM(k).eq. 1) AMAT(k)= 0. d0
    enddo
!C===

```

$T_1=0$
 対角成分=1, 右边=0, 非対角成分=0



プログラム: 1d.f(6/6)

第一種境界条件@x=0

```

!C
!C +-----+
!C | BOUNDARY CONDITIONS |
!C +-----+
!C===

!C
!C-- X=Xmin
    i= 1
    js= INDEX(i-1)

    AMAT(js+1)= 0. d0
    DIAG(i)= 1. d0
    RHS (i)= 0. d0

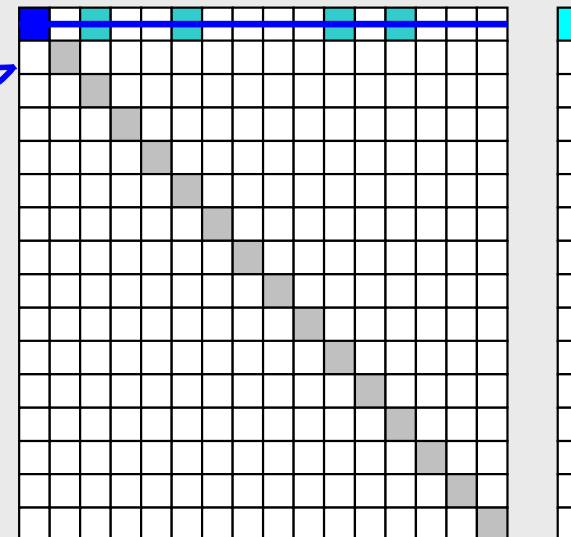
    do k= 1, NPLU
      if (ITEM(k).eq.1) AMAT(k)= 0. d0
    enddo
!C===

```

$$T_1=0$$

対角成分=1, 右辺=0, 非対角成分=0

ゼロクリア



プログラム: 1d.f(6/6)

第一種境界条件@x=0

```

!C
!C +-----+
!C | BOUNDARY CONDITIONS |
!C +-----+
!C===

!C
!C-- X=Xmin
      i= 1
      js= INDEX(i-1)

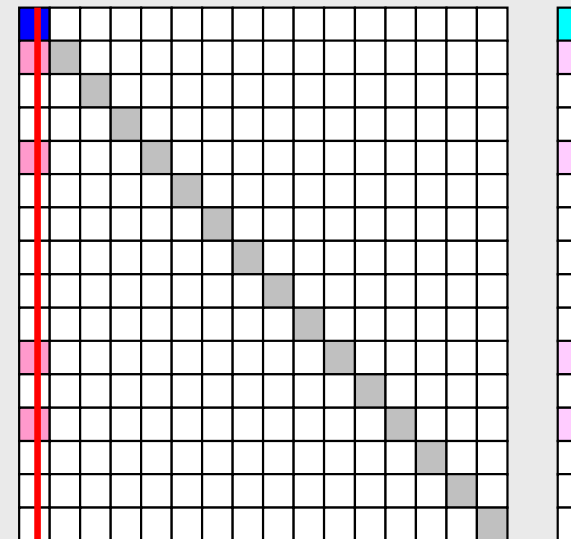
      AMAT(js+1)= 0. d0
      DIAG(i)= 1. d0
      RHS (i)= 0. d0

      do k= 1, NPLU
        if (ITEM(k).eq.1) AMAT(k)= 0. d0
      enddo
!C===

```

$T_1=0$
対角成分=1, 右辺=0, 非対角成分=0

消去, ゼロクリア



行列の対称性を保つため, 第一種境界条件を適用している節点に対応する「列」を, 右辺に移項して消去する(今の場合は非対角成分を0にするだけで良い)

第一種境界条件が $T \neq 0$ の場合

```
!C
!C +-----+
!C | BOUNDARY CONDITIONS |
!C +-----+
!C===
```

行列の対称性を保つため、第一種境界条件を適用している節点に対応する「列」を、右辺に移項して消去する

```
!C
!C-- X=Xmin
      i= 1
      jS= INDEX(i-1)
```

$$Diag_j \phi_j + \sum_{k=Index[j-1]+1}^{Index[j]} Amat_k \phi_{Item[k]} = Rhs_j$$

```
AMAT(jS+1)= 0. d0
DIAG(i)= 1. d0
RHS (i)= PHImin
```

```
do i= 1, N
  do k= INDEX(i-1)+1, INDEX(i)
    if (ITEM(k).eq.1) then
      RHS (i)= RHS(i) - AMAT(k)*PHImin
      AMAT(k)= 0. d0
    endif
  enddo
enddo
```

```
!C===
```

第一種境界条件が $T \neq 0$ の場合

```
!C
!C +-----+
!C | BOUNDARY CONDITIONS |
!C +-----+
!C===
```

行列の対称性を保つため、第一種境界条件を適用している節点に対応する「列」を、右辺に移項して消去する

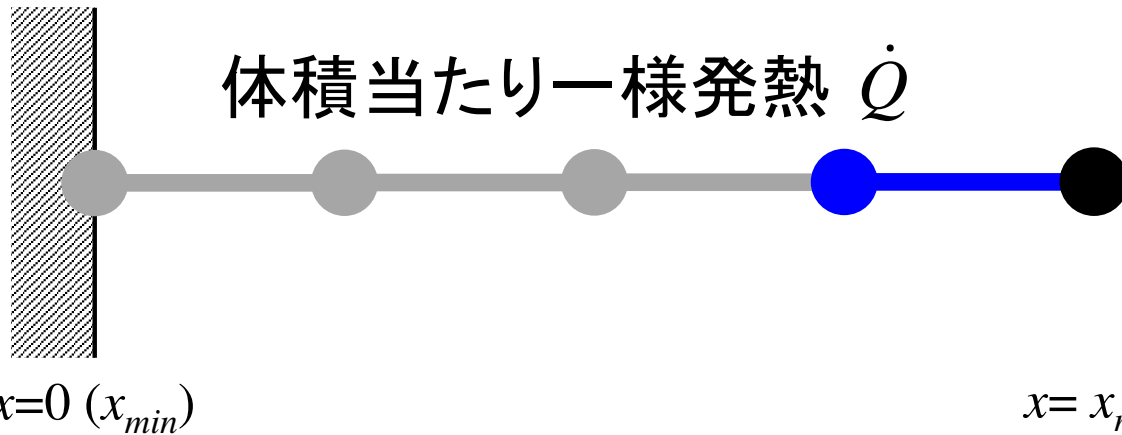
```
!C
!C-- X=Xmin
      i= 1
      jS= INDEX(i-1)

      AMAT(jS+1)= 0. d0
      DIAG(i)= 1. d0
      RHS (i)= PHImin
```

$$\begin{aligned}
 & \text{Diag}_j \phi_j + \sum_{k=\text{Index}[j-1]+1, k \neq k_s}^{\text{Index}[j]} \text{Amat}_k \phi_{\text{Item}[k]} \\
 &= \text{Rhs}_j - \text{Amat}_{k_s} \phi_{\text{Item}[k_s]} \\
 &= \text{Rhs}_j - \text{Amat}_{k_s} T_{\min} \quad \text{where } \text{Item}(k_s) = 1
 \end{aligned}$$

```
do i= 1, N
  do k= INDEX(i-1)+1, INDEX(i)
    if (ITEM(k).eq.1) then
      RHS (i)= RHS(i) - AMAT(k)*PHImin
      AMAT(k)= 0. d0
    endif
  enddo
enddo
!C===
```

第二種境界条件 (断熱)



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

$$T = 0 @ x = 0$$

$$\frac{\partial T}{\partial x} = 0 @ x = x_{max}$$

$$\int_S \bar{q} [N]^T dS = \bar{q} A \Big|_{x=L} = \bar{q} A \begin{Bmatrix} 0 \\ 1 \end{Bmatrix}, \quad \bar{q} = -\lambda \frac{dT}{dx}$$

表面熱流束



$$\frac{\partial T}{\partial x} = 0 @ x = x_{max}$$

断熱境界条件が成立するため, $\bar{q} = 0$
 従ってこの項の寄与は無い。
 断熱境界条件は何もしなくても成立
 → 自然境界条件

前処理付き共役勾配法

Preconditioned Conjugate Gradient Method (CG)

```
Compute  $\mathbf{r}^{(0)} = \mathbf{b} - [\mathbf{A}]\mathbf{x}^{(0)}$ 
for i= 1, 2, ...
  solve  $[\mathbf{M}]\mathbf{z}^{(i-1)} = \mathbf{r}^{(i-1)}$ 
   $\rho_{i-1} = \mathbf{r}^{(i-1)} \mathbf{z}^{(i-1)}$ 
  if i=1
     $\mathbf{p}^{(1)} = \mathbf{z}^{(0)}$ 
  else
     $\beta_{i-1} = \rho_{i-1} / \rho_{i-2}$ 
     $\mathbf{p}^{(i)} = \mathbf{z}^{(i-1)} + \beta_{i-1} \mathbf{p}^{(i-1)}$ 
  endif
   $\mathbf{q}^{(i)} = [\mathbf{A}]\mathbf{p}^{(i)}$ 
   $\alpha_i = \rho_{i-1} / \mathbf{p}^{(i)} \mathbf{q}^{(i)}$ 
   $\mathbf{x}^{(i)} = \mathbf{x}^{(i-1)} + \alpha_i \mathbf{p}^{(i)}$ 
   $\mathbf{r}^{(i)} = \mathbf{r}^{(i-1)} - \alpha_i \mathbf{q}^{(i)}$ 
  check convergence  $|\mathbf{r}|$ 
end
```

前処理: 対角スケーリング

対角スケーリング, 点ヤコビ前処理

- 前処理行列として, もとの行列の対角成分のみを取り出した行列を前処理行列 $[M]$ とする。
 - 対角スケーリング, 点ヤコビ (point-Jacobi) 前処理

$$[M] = \begin{bmatrix} D_1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & D_2 & & 0 & 0 \\ \dots & & \dots & & \dots \\ 0 & 0 & & D_{N-1} & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & D_N \end{bmatrix}$$

- **solve** $[M] \mathbf{z}^{(i-1)} = \mathbf{r}^{(i-1)}$ という場合に逆行列を簡単に求めることができる。

CGソルバー(1/6)

```
!C
!C +-----+
!C | CG iterations |
!C +-----+
!C===
      R = 1
      Z = 2
      Q = 2
      P = 3
      DD= 4

      do i= 1, N
        W(i, DD)= 1.0D0 / DIAG(i)
      enddo
```

```
W(i, 1) = W(i, R)   ⇒ {r}
W(i, 2) = W(i, Z)   ⇒ {z}
W(i, 2) = W(i, Q)   ⇒ {q}
W(i, 3) = W(i, P)   ⇒ {p}
W(i, 4) = W(i, DD) ⇒ 1/{D}
```

```
Compute  $r^{(0)} = b - [A]x^{(0)}$ 
for i= 1, 2, ...
  solve  $[M]z^{(i-1)} = r^{(i-1)}$ 
   $\rho_{i-1} = r^{(i-1)} \cdot z^{(i-1)}$ 
  if i=1
     $p^{(1)} = z^{(0)}$ 
  else
     $\beta_{i-1} = \rho_{i-1} / \rho_{i-2}$ 
     $p^{(i)} = z^{(i-1)} + \beta_{i-1} p^{(i-1)}$ 
  endif
   $q^{(i)} = [A]p^{(i)}$ 
   $\alpha_i = \rho_{i-1} / p^{(i)} q^{(i)}$ 
   $x^{(i)} = x^{(i-1)} + \alpha_i p^{(i)}$ 
   $r^{(i)} = r^{(i-1)} - \alpha_i q^{(i)}$ 
  check convergence |r|
end
```

CGソルバー(1/6)

```

!C
!C +-----+
!C | CG iterations |
!C +-----+
!C===
      R = 1
      Z = 2
      Q = 2
      P = 3
      DD= 4

      do i= 1, N
        W(i, DD)= 1.0D0 / DIAG(i)
      enddo

```

対角成分の逆数(前処理用)
 その都度, 除算をすると効率が
 悪いため, 予め配列に格納。
 嘗ては除算と加減乗算は10:1
 と言われていたが最近はそれ
 ほどでもない。

```

W(i, 1) = W(i, R)   ⇒ {r}
W(i, 2) = W(i, Z)   ⇒ {z}
W(i, 2) = W(i, Q)   ⇒ {q}
W(i, 3) = W(i, P)   ⇒ {p}
W(i, 4) = W(i, DD) ⇒ 1/{D}

```

CGソルバー(2/6)

```
!C
!C-- {r0} = {b} - [A]{xini} |
```

!C 初期残差

```
do i = 1, N
  W(i, R) = DIAG(i)*PHI(i)
  do j = INDEX(i-1)+1, INDEX(i)
    W(i, R) = W(i, R) + AMAT(j)*PHI(ITEM(j))
  enddo
enddo
```

```
BNRM2 = 0.0D0
```

```
do i = 1, N
  BNRM2 = BNRM2 + RHS(i) **2
  W(i, R) = RHS(i) - W(i, R)
enddo
```

$BNRM2 = |b|^2$

あとで収束判定に使用

Compute $r^{(0)} = b - [A]x^{(0)}$

```
for i = 1, 2, ...
  solve [M]z(i-1) = r(i-1)
  ρi-1 = r(i-1) z(i-1)
  if i = 1
    p(1) = z(0)
  else
    βi-1 = ρi-1 / ρi-2
    p(i) = z(i-1) + βi-1 p(i-1)
  endif
  q(i) = [A]p(i)
  αi = ρi-1 / p(i) q(i)
  x(i) = x(i-1) + αi p(i)
  r(i) = r(i-1) - αi q(i)
  check convergence |r|
end
```

CGソルバー (3/6)

```

do iter= 1, ITERmax

!C
!C-- {z}= [Minv]{r}

do i= 1, N
  W(i, Z)= W(i, DD) * W(i, R)
enddo

!C
!C-- RHO= {r} {z}

RHO= 0. d0
do i= 1, N
  RHO= RHO + W(i, R)*W(i, Z)
enddo

```

```

Compute  $r^{(0)} = b - [A]x^{(0)}$ 
for  $i = 1, 2, \dots$ 
  solve  $[M]z^{(i-1)} = r^{(i-1)}$ 
   $\rho_{i-1} = r^{(i-1)} z^{(i-1)}$ 
  if  $i=1$ 
     $p^{(1)} = z^{(0)}$ 
  else
     $\beta_{i-1} = \rho_{i-1} / \rho_{i-2}$ 
     $p^{(i)} = z^{(i-1)} + \beta_{i-1} p^{(i-1)}$ 
  endif
   $q^{(i)} = [A]p^{(i)}$ 
   $\alpha_i = \rho_{i-1} / p^{(i)} q^{(i)}$ 
   $x^{(i)} = x^{(i-1)} + \alpha_i p^{(i)}$ 
   $r^{(i)} = r^{(i-1)} - \alpha_i q^{(i)}$ 
  check convergence  $|r|$ 
end

```

CGソルバー (4/6)

```

!C
!C-- {p} = {z} if      ITER=1
!C  BETA= RHO / RH01  otherwise

      if ( iter.eq.1 ) then
        do i= 1, N
          W(i,P)= W(i,Z)
        enddo
      else
        BETA= RHO / RH01
        do i= 1, N
          W(i,P)= W(i,Z) + BETA*W(i,P)
        enddo
      endif

!C
!C-- {q}= [A] {p}

      do i= 1, N
        W(i,Q) = DIAG(i)*W(i,P)
        do j= INDEX(i-1)+1, INDEX(i)
          W(i,Q) = W(i,Q) + AMAT(j)*W(ITEM(j),P)
        enddo
      enddo

```

```

Compute  $r^{(0)} = b - [A]x^{(0)}$ 
for  $i = 1, 2, \dots$ 
  solve  $[M]z^{(i-1)} = r^{(i-1)}$ 
   $\rho_{i-1} = r^{(i-1)} z^{(i-1)}$ 
  if  $i=1$ 
     $p^{(1)} = z^{(0)}$ 
  else
     $\beta_{i-1} = \rho_{i-1} / \rho_{i-2}$ 
     $p^{(i)} = z^{(i-1)} + \beta_{i-1} p^{(i-1)}$ 
  endif
   $q^{(i)} = [A]p^{(i)}$ 
   $\alpha_i = \rho_{i-1} / p^{(i)} q^{(i)}$ 
   $x^{(i)} = x^{(i-1)} + \alpha_i p^{(i)}$ 
   $r^{(i)} = r^{(i-1)} - \alpha_i q^{(i)}$ 
  check convergence  $|r|$ 
end

```

CGソルバー (5/6)

```

!C
!C-- ALPHA= RHO / {p} {q}

      C1= 0. d0
      do i= 1, N
        C1= C1 + W(i, P)*W(i, Q)
      enddo
      ALPHA= RHO / C1

!C
!C-- {x}= {x} + ALPHA*{p}
!C  {r}= {r} - ALPHA*{q}

      do i= 1, N
        PHI (i)= PHI (i) + ALPHA * W(i, P)
        W(i, R)= W(i, R) - ALPHA * W(i, Q)
      enddo

```

```

Compute  $r^{(0)} = b - [A]x^{(0)}$ 
for i= 1, 2, ...
  solve  $[M]z^{(i-1)} = r^{(i-1)}$ 
   $\rho_{i-1} = r^{(i-1)} z^{(i-1)}$ 
  if i=1
     $p^{(1)} = z^{(0)}$ 
  else
     $\beta_{i-1} = \rho_{i-1} / \rho_{i-2}$ 
     $p^{(i)} = z^{(i-1)} + \beta_{i-1} p^{(i-1)}$ 
  endif
   $q^{(i)} = [A]p^{(i)}$ 
   $\alpha_i = \rho_{i-1} / p^{(i)} q^{(i)}$ 
   $x^{(i)} = x^{(i-1)} + \alpha_i p^{(i)}$ 
   $r^{(i)} = r^{(i-1)} - \alpha_i q^{(i)}$ 
  check convergence  $|r|$ 
end

```

CGソルバー(6/6)

```
DNRM2 = 0.0
do i= 1, N
  DNRM2= DNRM2 + W(i,R)**2
enddo
```

```
RESID= dsqrt(DNRM2/BNRM2)
```

```
if ( RESID.le.EPS) goto 900
RHO1 = RHO  ρi-2
```

```
enddo
```

```
900 continue
```

$$\text{Resid} = \sqrt{\frac{\text{DNorm2}}{\text{BNorm2}}} = \frac{|r|}{|b|} = \frac{|b - Ax|}{|b|} \leq \text{Eps}$$

$|r|, |b|$: 2 / L2 / Euclidean - norm ($\|r\|_2, \|b\|_2$)

制御ファイル input.dat

```
4          NE (要素数)
1.0  1.0  1.0  1.0  Δx (要素長さL), Q, A, λ
100       反復回数
1.e-8     CG法の反復打切誤差 Eps
```

Compute $r^{(0)} = b - [A]x^{(0)}$

for $i = 1, 2, \dots$

solve $[M]z^{(i-1)} = r^{(i-1)}$

$\rho_{i-1} = r^{(i-1)} z^{(i-1)}$

if $i=1$

$p^{(1)} = z^{(0)}$

else

$\beta_{i-1} = \rho_{i-1} / \rho_{i-2}$

$p^{(i)} = z^{(i-1)} + \beta_{i-1} p^{(i-1)}$

endif

$q^{(i)} = [A]p^{(i)}$

$\alpha_i = \rho_{i-1} / p^{(i)} q^{(i)}$

$x^{(i)} = x^{(i-1)} + \alpha_i p^{(i)}$

$r^{(i)} = r^{(i-1)} - \alpha_i q^{(i)}$

check convergence $|r|$

end

$$Ax = b \Rightarrow \alpha Ax = \alpha b$$

$$r = b - Ax \Rightarrow R = \alpha b - \alpha Ax = \alpha r$$

有限要素法の処理: プログラム

- 初期化
 - 制御変数読み込み
 - 座標読み込み⇒要素生成(N:節点数, NE:要素数)
 - 配列初期化(全体マトリクス, 要素マトリクス)
 - 要素⇒全体マトリクスマッピング(Index, Item)
- マトリクス生成
 - 要素単位の処理(do icel= 1, NE)
 - 要素マトリクス計算
 - 全体マトリクスへの重ね合わせ
 - 境界条件の処理
- 連立一次方程式
 - 共役勾配法(CG)

より精度をあげるには？

- メッシュを細かくする

NE=8, dx=12.5

8 iters, RESID= 2.822910E-16 U(N)= 1.953586E-01

DISPLACEMENT

1	0.000000E+00	-0.000000E+00
2	1.101928E-02	1.103160E-02
3	2.348034E-02	2.351048E-02
4	3.781726E-02	3.787457E-02
5	5.469490E-02	5.479659E-02
6	7.520772E-02	7.538926E-02
7	1.013515E-01	1.016991E-01
8	1.373875E-01	1.381746E-01
9	1.953586E-01	1.980421E-01



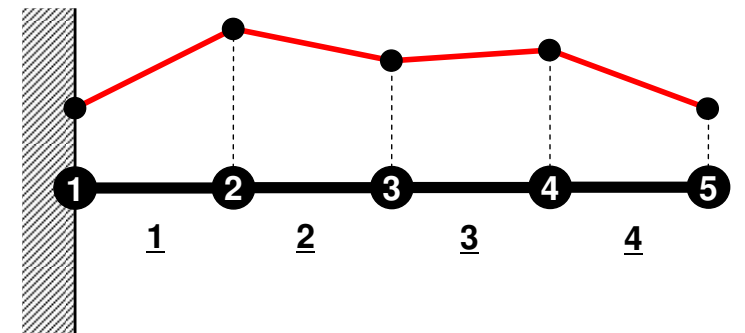
$$A = A_1 x + A_2 \quad (> 0)$$

NE=20, dx=5

20 iters, RESID= 5.707508E-15 U(N)= 1.975734E-01

DISPLACEMENT

1	0.000000E+00	-0.000000E+00
2	4.259851E-03	4.260561E-03
3	8.719160E-03	8.720685E-03
4	1.339752E-02	1.339999E-02
.....		
17	1.145876E-01	1.146641E-01
18	1.295689E-01	1.296764E-01
19	1.473466E-01	1.475060E-01
20	1.692046E-01	1.694607E-01
21	1.975734E-01	1.980421E-01



$$u = \frac{F}{EA_1} \left[\log(A_1 x + A_2) - \log(A_2) \right]$$

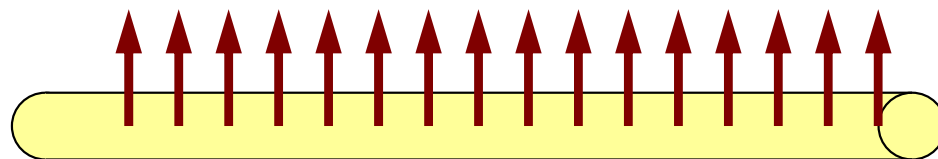
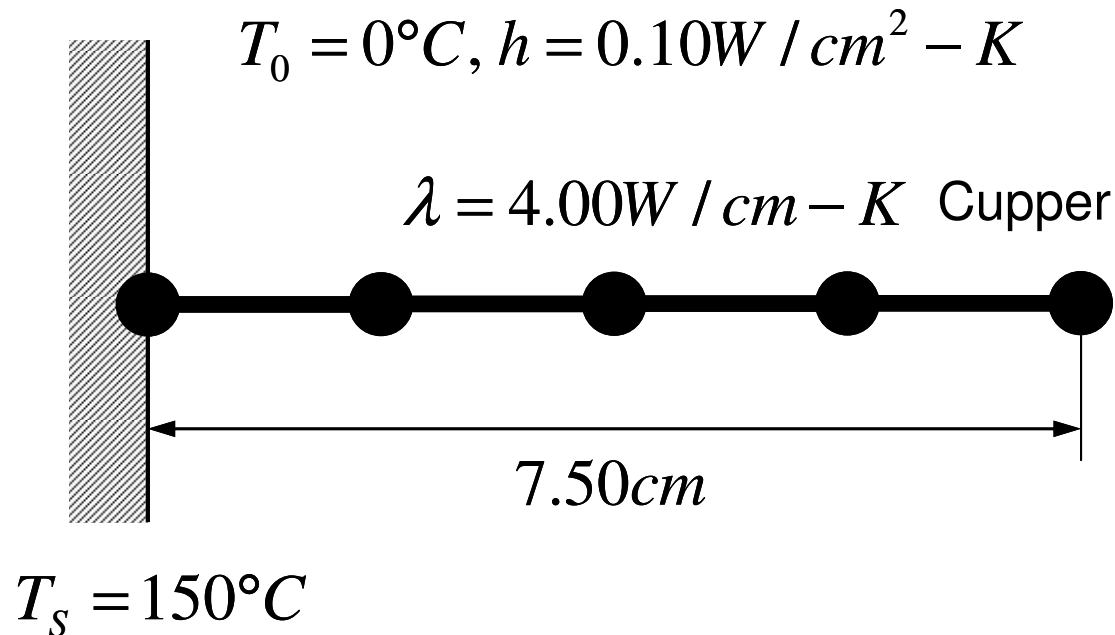
より精度をあげるには？

- メッシュを細かくする
- 高次の補間関数(形状関数)を使用する
 - 高次要素
 - 線形要素, 一次要素は低次要素と呼ばれる
- n 次微分係数の連続性を保証する定式化を適用する
 - C^n 連続性

より精度をあげるには？

- メッシュを細かくする
- 高次の補間関数(形状関数)を使用する
- n 次微分係数の連続性を保証する定式化を適用する
 - C^n 連続性
- これまで紹介してきたのは:
 - 一次要素(線形要素)
 - 区分的一次近似(Piecewise Linear)
 - C^0 連続
 - 従属変数(のみ)が要素境界で連続
- **高次要素の例:**
 - **二次要素: 曲線の近似により適している**
 - 要素内で二次関数的な分布
 - C^0 連続

Example: 1D Heat Transfer (1/2)



Convective Heat Transfer on
Cylindrical Surface

- Temp. Thermal Fins
- Circular Sectional Area,
 $r=1\text{cm}$
- Boundary Condition
 - $x=0$: Fixed Temperature
 - $x=7.5$: Insulated
- Convective Heat Transfer on Cylindrical Surface
 - $q = h(T - T_0)$
 - q : Heat Flux
 - Heat Flow/Unit Surface Area/sec.

Example: 1D Heat Transfer (2/2)

RESULTS (linear interpolation)

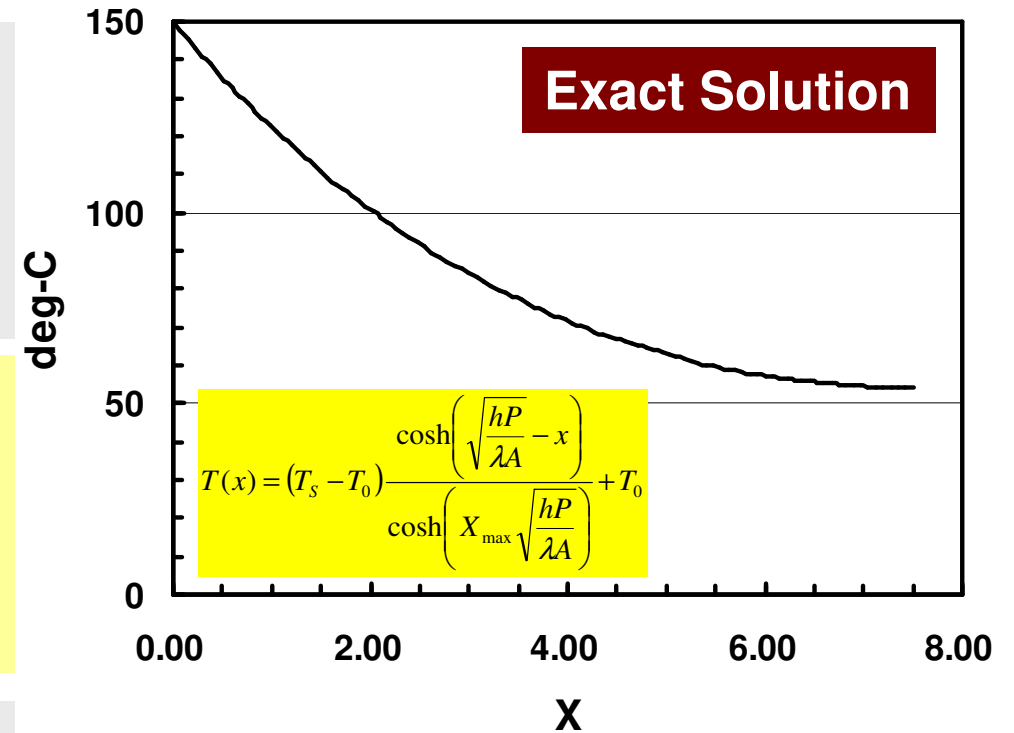
ID	X	FEM.	ANALYTICAL	ERR (%)
1	0.00000	150.00000	150.00000	0.00000
2	1.87500	102.62226	103.00165	0.25292
3	3.75000	73.82803	74.37583	0.36520
4	5.62500	58.40306	59.01653	0.40898
5	7.50000	53.55410	54.18409	0.41999

RESULTS (quadratic interpolation)

ID	X	FEM.	ANALYTICAL	ERR (%)
1	0.00000	150.00000	150.00000	0.00000
2	1.87500	102.98743	103.00165	0.00948
3	3.75000	74.40203	74.37583	0.01747
4	5.62500	59.02737	59.01653	0.00722
5	7.50000	54.21426	54.18409	0.02011

RESULTS (linear interpolation)

ID	X	FEM.	ANALYTICAL	ERR (%)
1	0.00000	150.00000	150.00000	0.00000
2	0.93750	123.71561	123.77127	0.03711
3	1.87500	102.90805	103.00165	0.06240
4	2.81250	86.65618	86.77507	0.07926
5	3.75000	74.24055	74.37583	0.09019
6	4.68750	65.11151	65.25705	0.09703
7	5.62500	58.86492	59.01653	0.10107
8	6.56250	55.22426	55.37903	0.10317
9	7.50000	54.02836	54.18409	0.10382

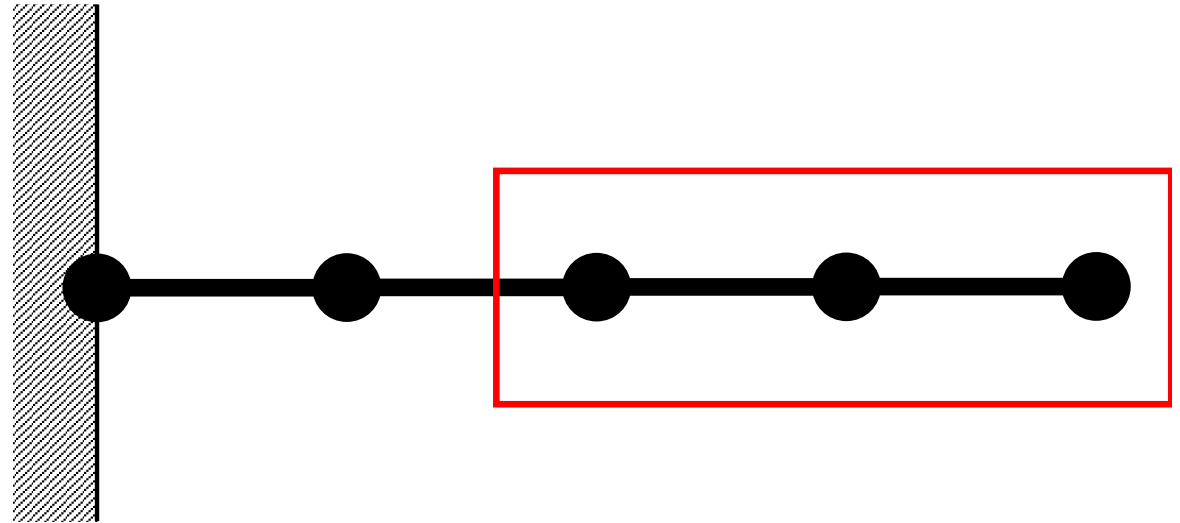


Quadratic interpolation provides more accurate solution, especially if X is close to 7.50cm.

1D Quadratic Element (1/2)

一次元二次要素

- Length= L
- (i,k): Both Ends
- (j): Intermediate Node
 - ✓ Mid-Point (中間節点)



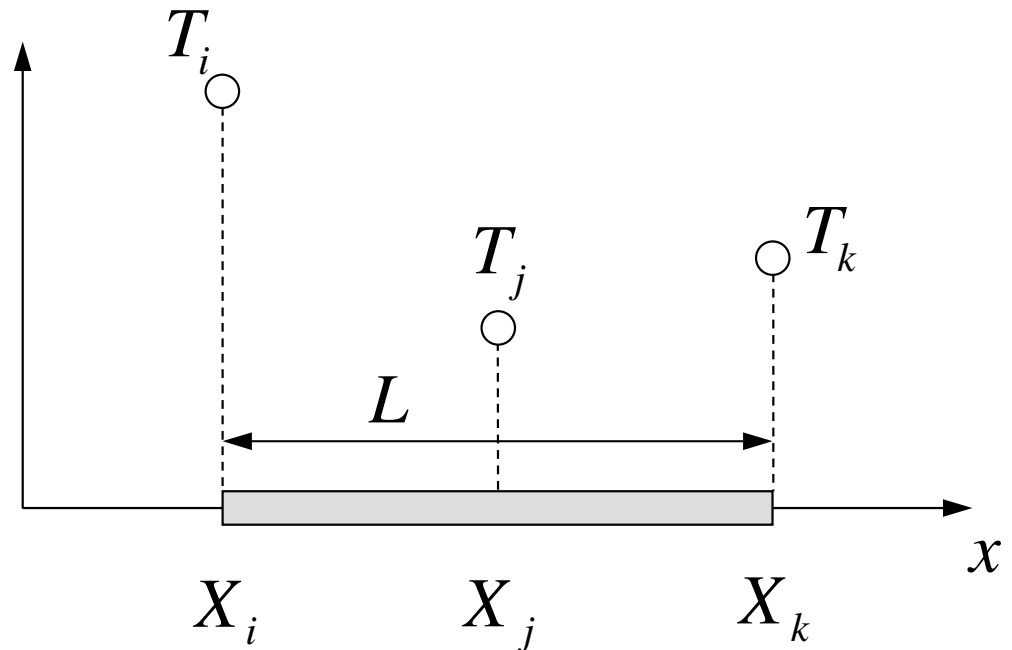
- Distribution of T in each element:

$$T = \alpha_1 + \alpha_2 x + \alpha_3 x^2$$

$$T_i = \alpha_1 + X_i \alpha_2 + X_i^2 \alpha_3$$

$$T_j = \alpha_1 + X_j \alpha_2 + X_j^2 \alpha_3$$

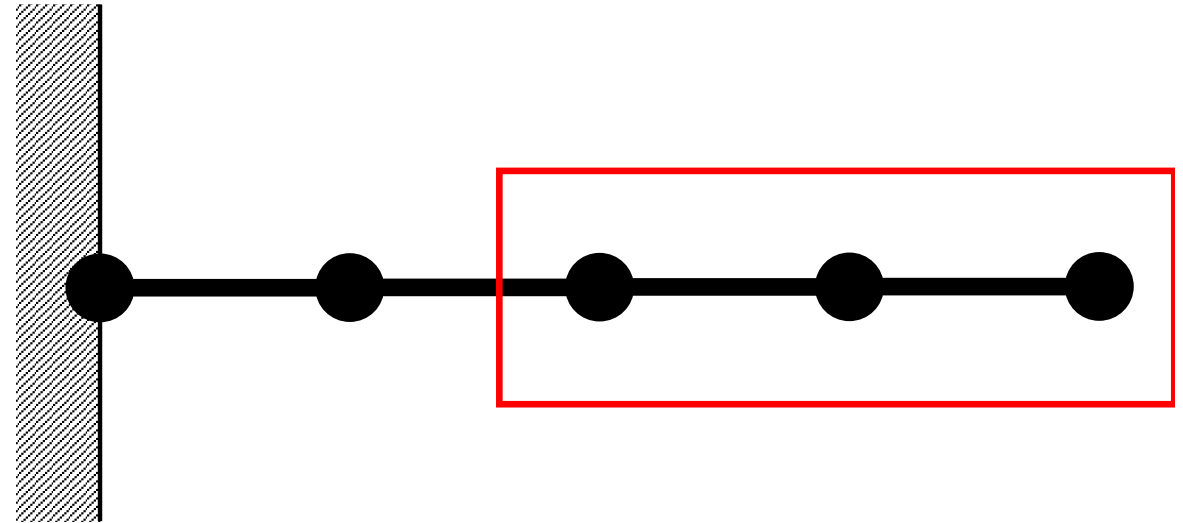
$$T_k = \alpha_1 + X_k \alpha_2 + X_k^2 \alpha_3$$



1D Quadratic Element (1/2)

一次元二次要素

- Length= L
- (i,k): Both Ends
- (j): Intermediate Node
✓ Mid-Point (中間節点)

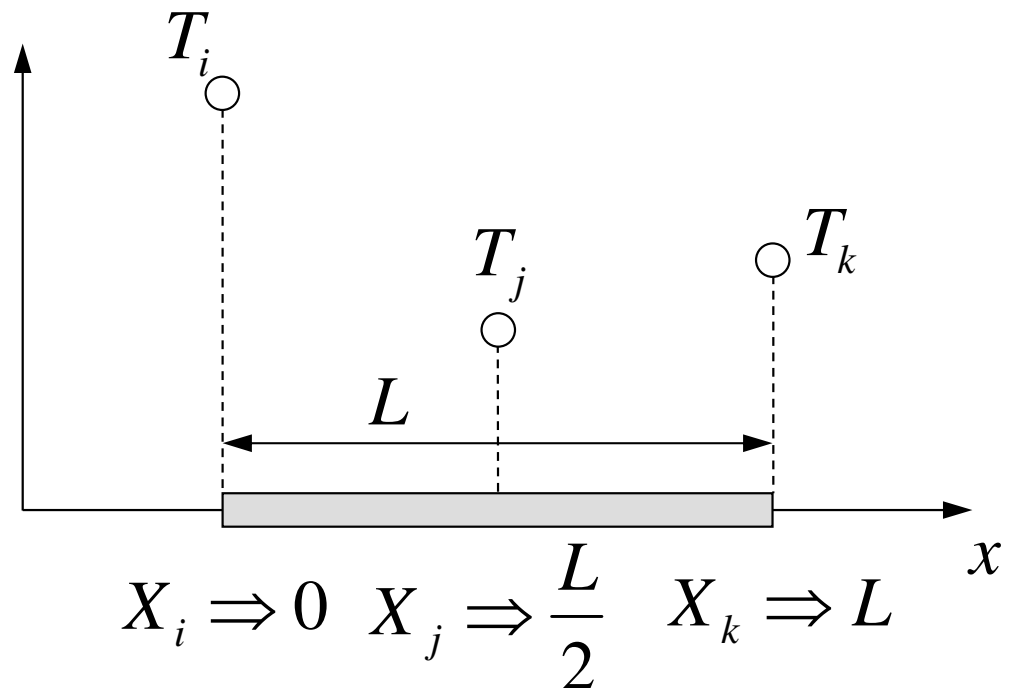


- Distribution of T in each element:

$$T = \alpha_1 + \alpha_2 x + \alpha_3 x^2$$

$$u_i = \alpha_1, \quad u_j = \alpha_1 + \frac{L}{2}\alpha_2 + \frac{L^2}{4}\alpha_3$$

$$u_k = \alpha_1 + L\alpha_2 + L^2\alpha_3$$



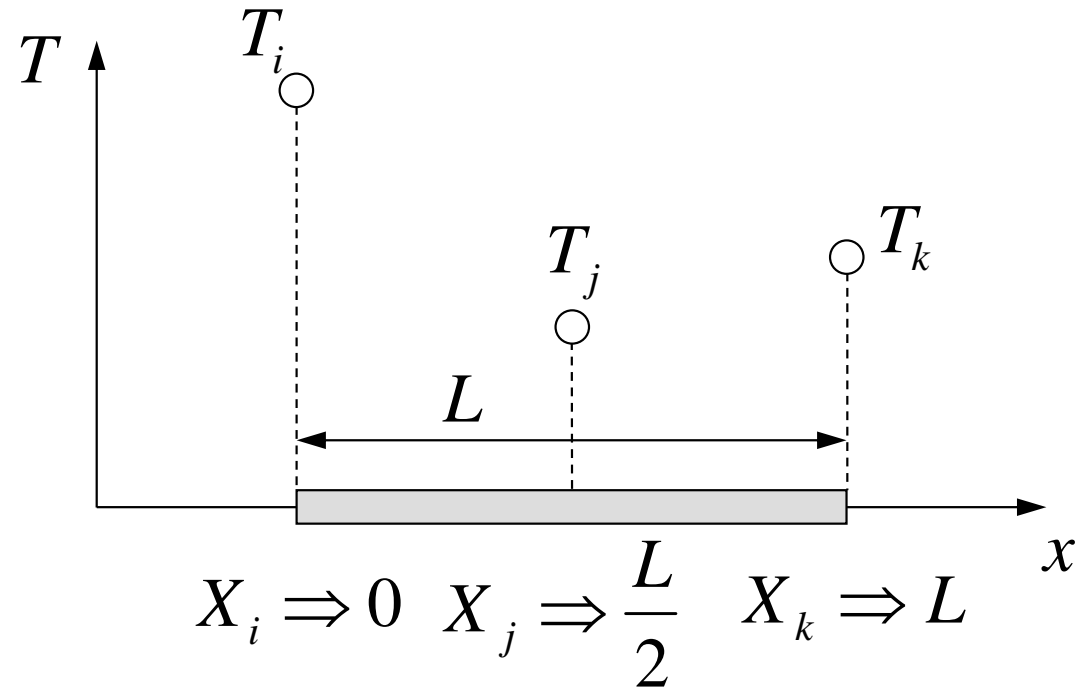
1D Quadratic Element (2/2)

一次元二次要素

- Coef's are calculated based on info. at each node:

$$\alpha_1 = T_i, \alpha_2 = \frac{4T_i - 3T_j - T_k}{L},$$

$$\alpha_3 = \frac{2}{L^2} (T_i - 2T_j + T_k)$$

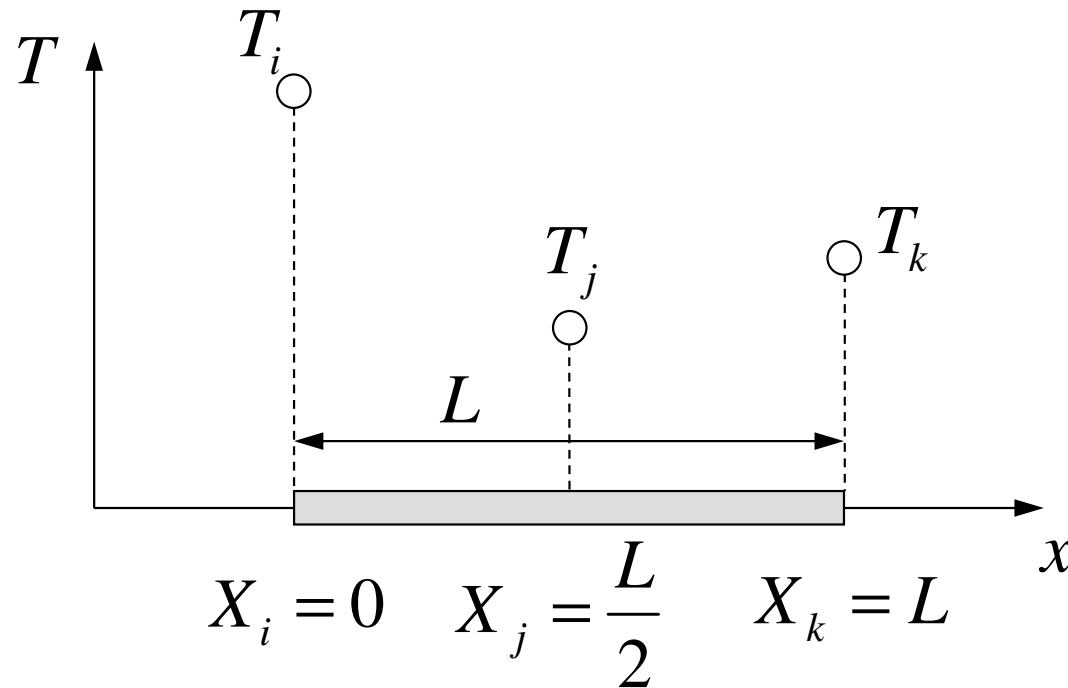


- Shape Functions: N_i , N_j , N_k

$$\begin{aligned} T &= N_i T_i + N_j T_j + N_k T_k \\ &= \left(1 - \frac{2x}{L}\right) \left(1 - \frac{x}{L}\right) T_i + \left(\frac{4x}{L}\right) \left(1 - \frac{x}{L}\right) T_j + \left(-\frac{x}{L}\right) \left(1 - \frac{2x}{L}\right) T_k \end{aligned}$$

1D Quadratic Element

一次元二次要素



Intermediate Node
Mid Point: j

Integration over Each Element: $[k]$ (1/2)

$$N_i = \left(1 - \frac{2x}{L}\right) \left(1 - \frac{x}{L}\right)$$

$$\frac{dN_i}{dx} = \left(\frac{4x}{L^2} - \frac{3}{L}\right)$$

$$N_j = \left(\frac{4x}{L}\right) \left(1 - \frac{x}{L}\right)$$

$$\frac{dN_j}{dx} = \left(\frac{4}{L} - \frac{8x}{L^2}\right)$$

$$N_k = \left(-\frac{x}{L}\right) \left(1 - \frac{2x}{L}\right)$$

$$\frac{dN_k}{dx} = \left(\frac{4x}{L^2} - \frac{1}{L}\right)$$


Integration over Each Element: $[k]$ (2/2)

$$\int_V \lambda \left(\frac{d[N]^T}{dx} \frac{d[N]}{dx} \right) dV = \int_0^L \begin{bmatrix} dN_i / dx \\ dN_j / dx \\ dN_k / dx \end{bmatrix} \lambda \left[\frac{dN_i}{dx}, \frac{dN_j}{dx}, \frac{dN_k}{dx} \right] A dx$$

$$= \lambda A \int_0^L \begin{bmatrix} \frac{dN_i}{dx} \frac{dN_i}{dx} & \frac{dN_i}{dx} \frac{dN_j}{dx} & \frac{dN_i}{dx} \frac{dN_k}{dx} \\ \frac{dN_j}{dx} \frac{dN_i}{dx} & \frac{dN_j}{dx} \frac{dN_j}{dx} & \frac{dN_j}{dx} \frac{dN_k}{dx} \\ \frac{dN_k}{dx} \frac{dN_i}{dx} & \frac{dN_k}{dx} \frac{dN_j}{dx} & \frac{dN_k}{dx} \frac{dN_k}{dx} \end{bmatrix} dx = \frac{\lambda A}{6L} \begin{bmatrix} +14 & -16 & +2 \\ -16 & +32 & -16 \\ +2 & -16 & +14 \end{bmatrix}$$

Integration over Each Element: $\{f\}$

$$\int_V \dot{Q} [N]^T dV = \dot{Q} A \int_0^L \begin{bmatrix} N_i \\ N_j \\ N_k \end{bmatrix} dx = \dot{Q} A \int_0^L \begin{bmatrix} 1 - \frac{3x}{L} + \frac{2x^2}{L^2} \\ \frac{4x}{L} - \frac{4x^2}{L^2} \\ -\frac{x}{L} + \frac{2x^2}{L^2} \end{bmatrix} dx = \frac{\dot{Q} A L}{6} \begin{Bmatrix} 1 \\ 4 \\ 1 \end{Bmatrix}$$

$1 : 4 : 1$


The Ratio was 1:1 in Linear Element

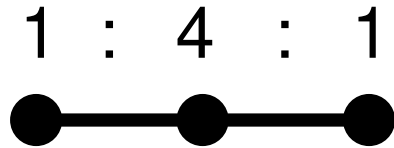
$$N_i = \left(\frac{X_j - x}{L} \right), \quad N_j = \left(\frac{x - X_i}{L} \right) \quad \frac{dN_i}{dx} = \left(\frac{-1}{L} \right), \quad \frac{dN_j}{dx} = \left(\frac{1}{L} \right)$$

$$\int_V \dot{Q} [N]^T dV = \dot{Q} A \int_0^L \begin{bmatrix} 1 - x/L \\ x/L \end{bmatrix} dx = \frac{\dot{Q} A L}{2} \begin{Bmatrix} 1 \\ 1 \end{Bmatrix}$$



Integration over Each Element: $\{f\}$

$$\int_V \dot{Q} [N]^T dV = \dot{Q} A \int_0^L \begin{bmatrix} N_i \\ N_j \\ N_k \end{bmatrix} dx = \dot{Q} A \int_0^L \begin{bmatrix} 1 - \frac{3x}{L} + \frac{2x^2}{L^2} \\ \frac{4x}{L} - \frac{4x^2}{L^2} \\ -\frac{x}{L} + \frac{2x^2}{L^2} \end{bmatrix} dx = \frac{\dot{Q} A L}{6} \begin{Bmatrix} 1 \\ 4 \\ 1 \end{Bmatrix}$$



Volume
Heat Flux

$$\int_S \bar{q} [N]^T dS = \bar{q} A \Big|_{x=L} = \bar{q} A \begin{Bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{Bmatrix}$$

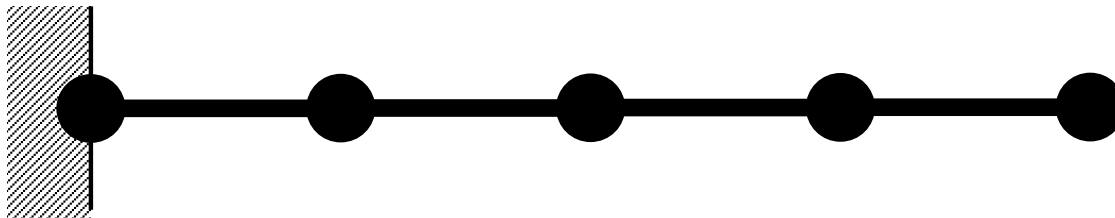
Surface
Heat Flux

Element Eqn's/Accumulation

1D Linear Element

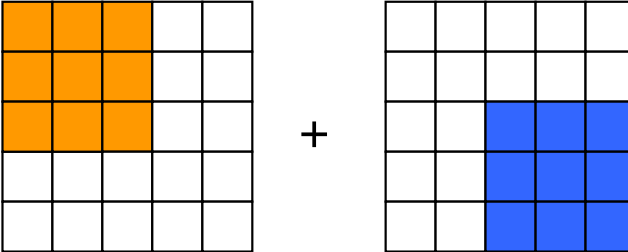
$$[K] = \sum_{i=1}^4 [k^{(i)}] =$$

$$\{F\} = \sum_{i=1}^4 \{f^{(i)}\} =$$



Element Eqn's/Accumulation

1D Quadratic Element, 2 Elements

$$[K] = \sum_{i=1}^2 [k^{(i)}] =$$


$$\{F\} = \sum_{i=1}^4 \{f^{(i)}\} =$$
