有限要素法による
一次元定常熱伝導解析プログラム
C言語編

中島 研吾

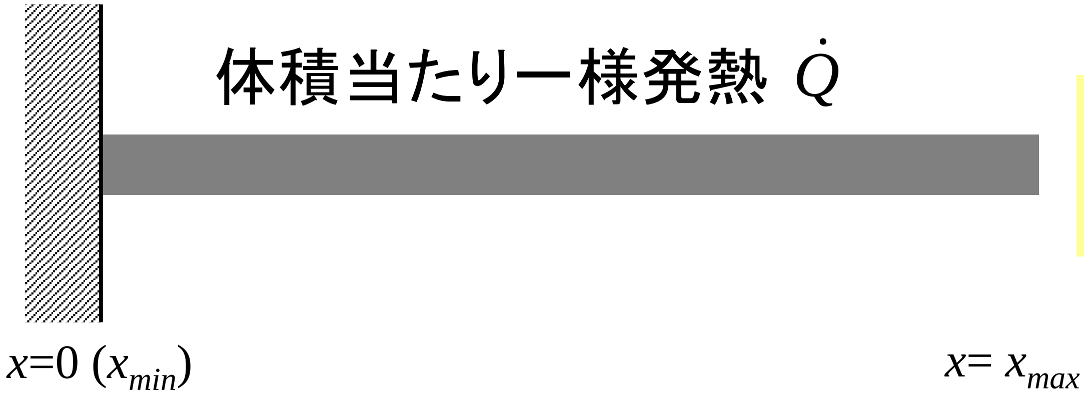
東京大学情報基盤センター

- 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

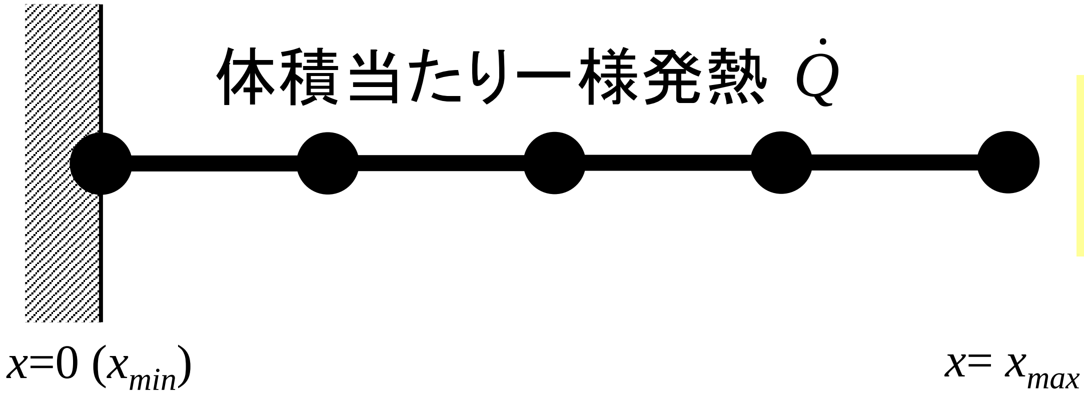
対象とする問題：一次元熱伝導問題



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

- 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）
  - $x=x_{max}$ ： $\dfrac{\partial T}{\partial x}=0$ （断熱）

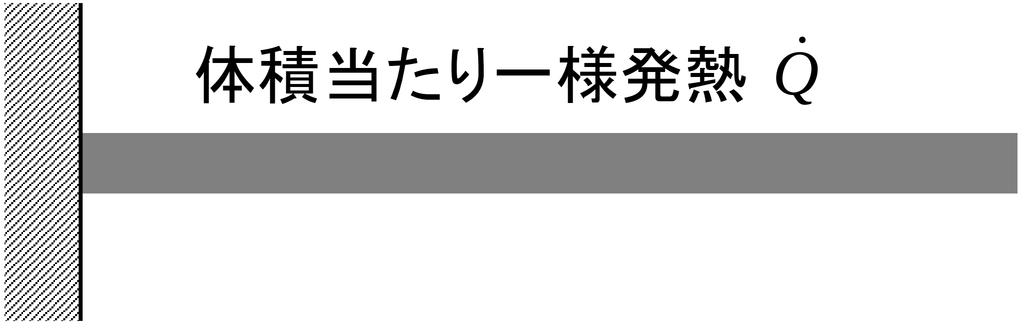
対象とする問題：一次元熱伝導問題



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

- 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} ： $\dfrac{\partial T}{\partial x}=0$（断熱）

解析解



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

x=0 (x_{min})　　　x= x_{max}

$$T=0 @ x=0$$

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

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

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

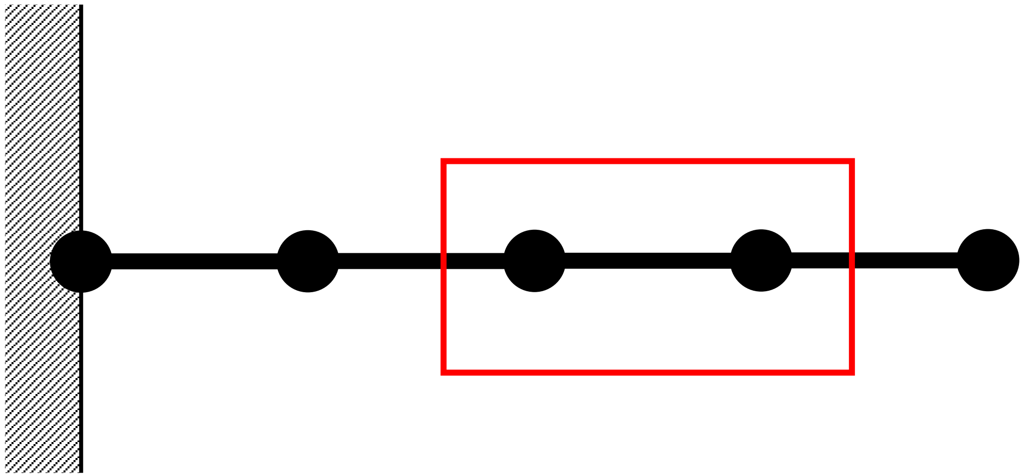
$$\lambda T=-\frac{1}{2}\dot{Q}x^2+C_1 x+C_2 \Rightarrow C_2=0, \quad T=0 @ x=0$$

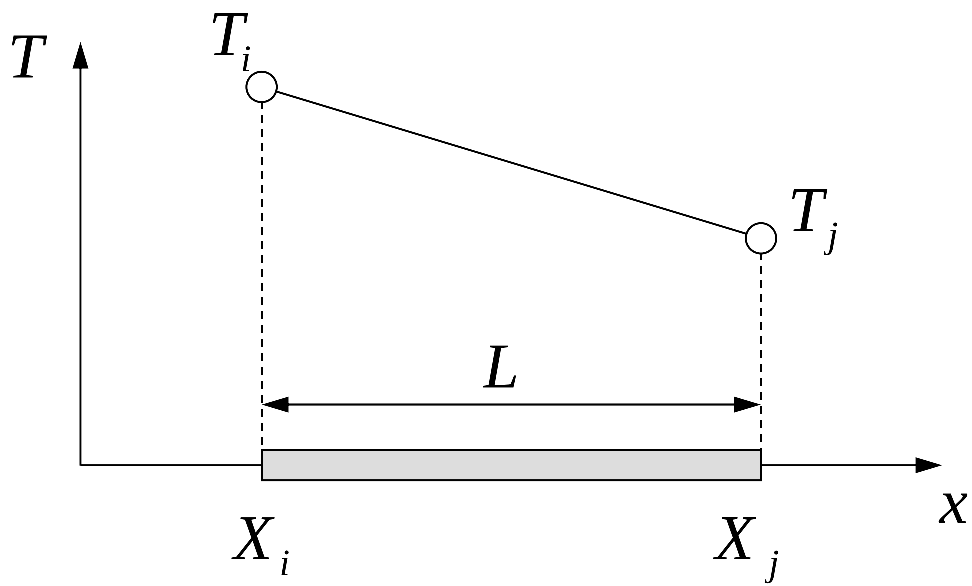
$$\therefore \quad T=-\frac{1}{2\lambda}\dot{Q}x^2+\frac{\dot{Q}x_{\max}}{\lambda}x$$

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）：

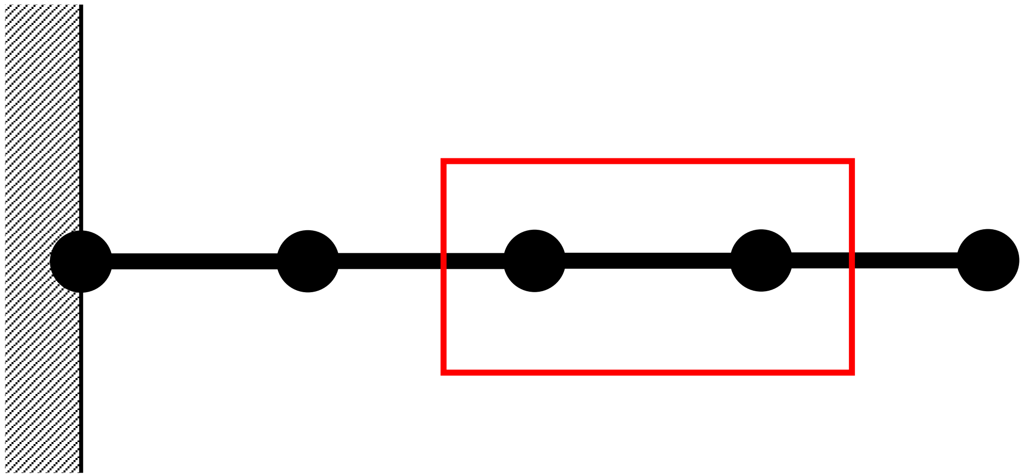
$$T = \alpha_1 + \alpha_2 x$$





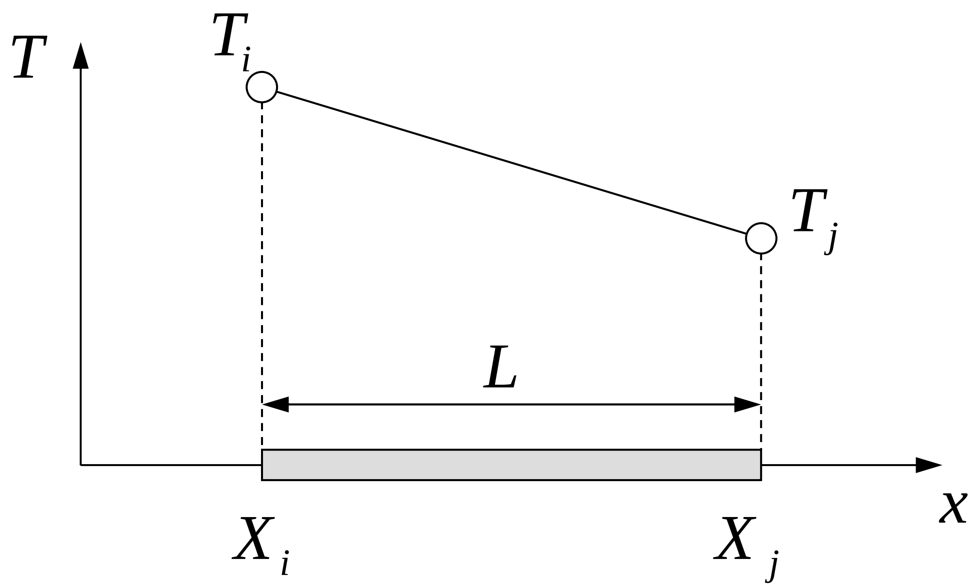
一次元線形要素（1/4）

- 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

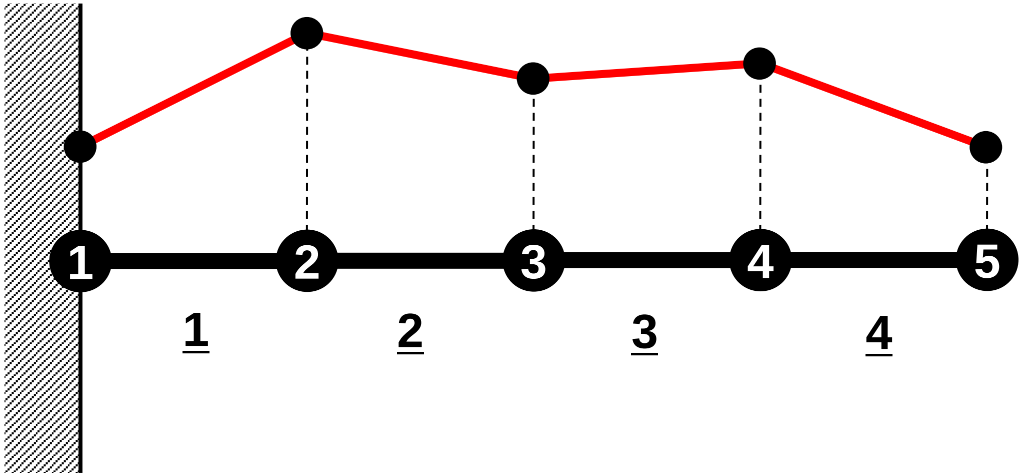


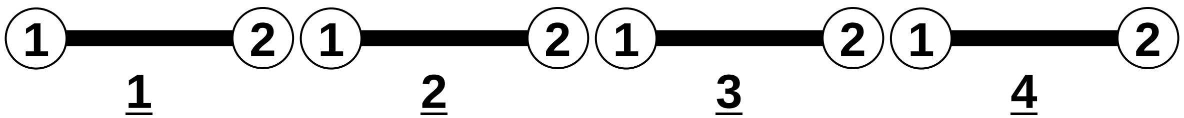
  - 節点 i,j における温度を T_i, T_j
  - 要素内での温度Tは以下のように表される（座標xの一次関数, Piecewise Linear）：

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



Piecewise Linear
各要素内で「温度Tの分布」が線形





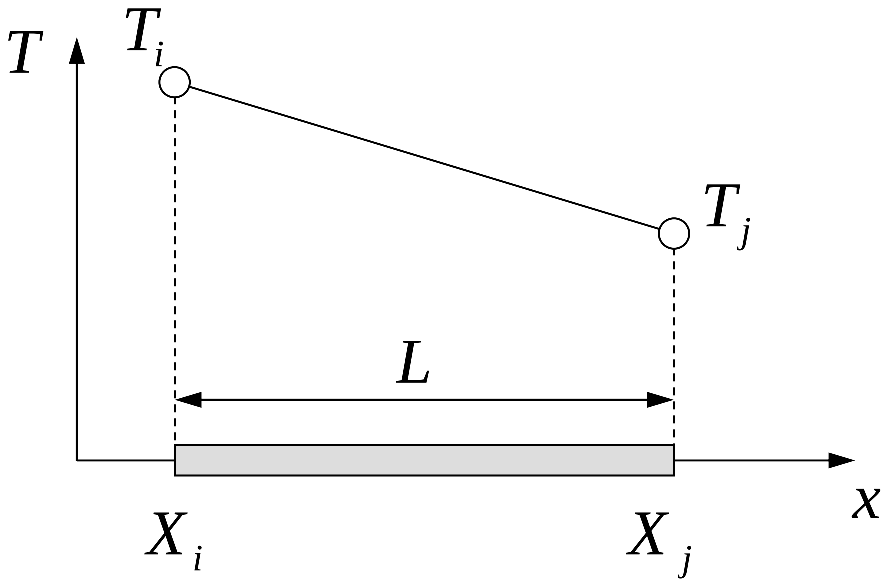
温度勾配は要素内で一定
(節点で不連続となる可能性あり)

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：

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

- 元の式に代入して，書き直すと以下のようになる

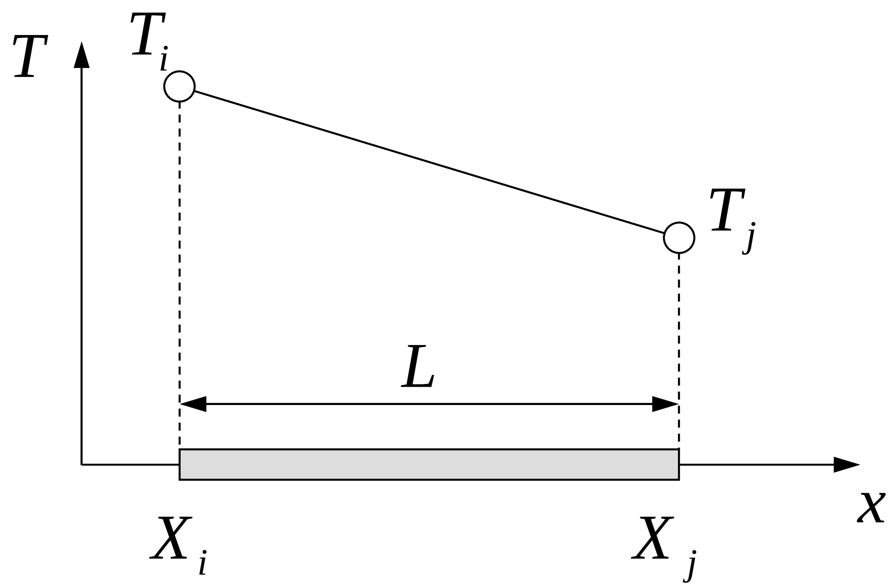
$$T = \underbrace{\boxed{\left(\frac{X_j - x}{L}\right)}}_{N_i} T_i + \underbrace{\boxed{\left(\frac{x - X_i}{L}\right)}}_{N_j} T_j$$

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$\mathrm{N_k}$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

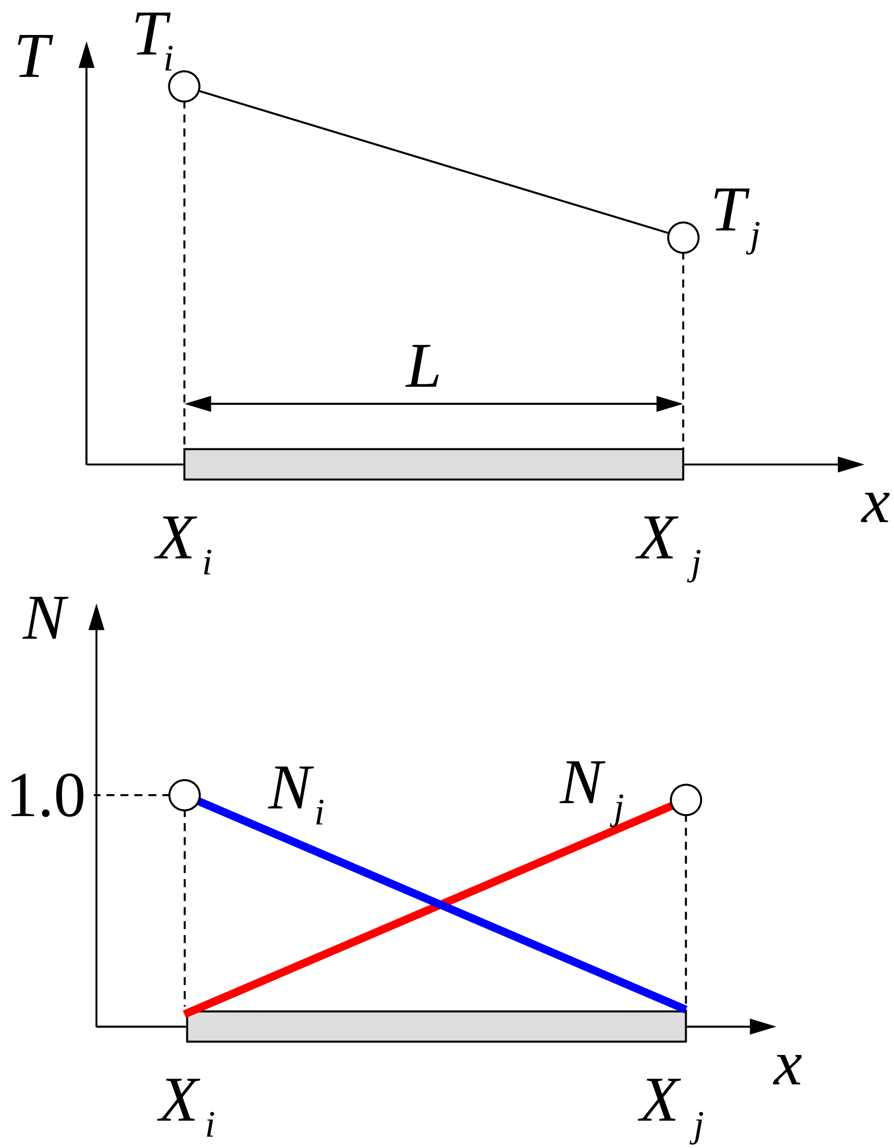
a_i　係数（未知数）

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：

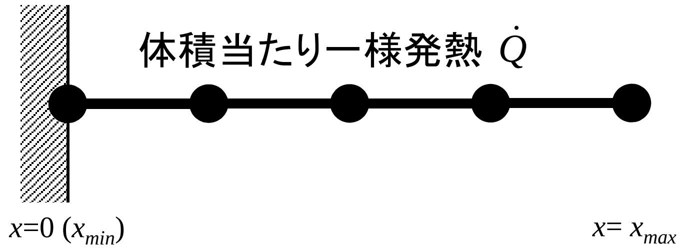
$$N_i = \left(\frac{X_j - x}{L}\right), \quad N_j = \left(\frac{x - X_i}{L}\right)$$

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）：



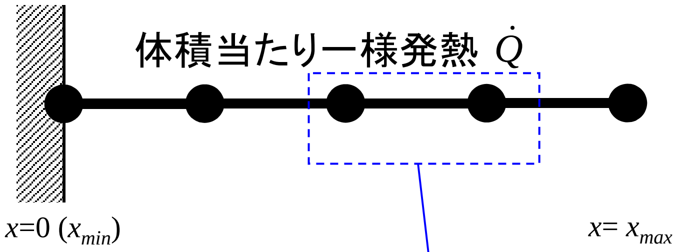
$$\lambda\left(\frac{d^2T}{dx^2}\right)+\dot{Q}=0$$

$$T=[N]\{\phi\}$$ 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：

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

ガラーキン法の適用（2/4）



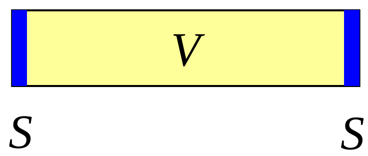
- 一次元のグリーンの定理

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

- これを前式の2階微分の部分に適用すると：

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

- これに以下を代入する：

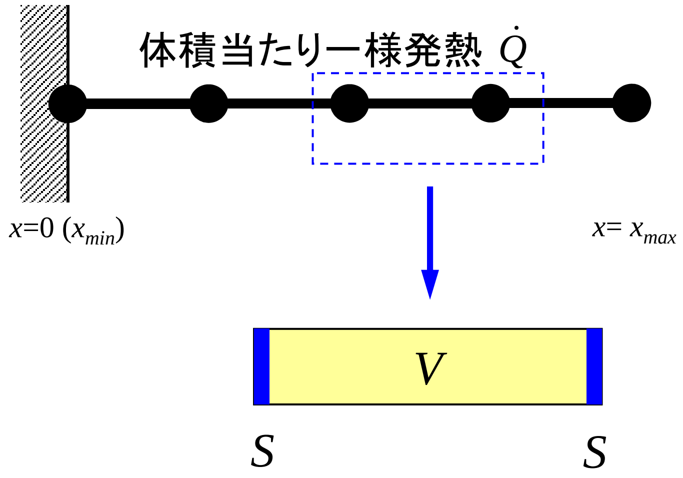


$$T = [N]\{\phi\},\quad \frac{dT}{dx} = \frac{d[N]}{dx}\{\phi\} \qquad \bar{q} = -\lambda\frac{dT}{dx}$$

:要素表面熱流量〔$QL^{-2}T^{-1}$〕

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：



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

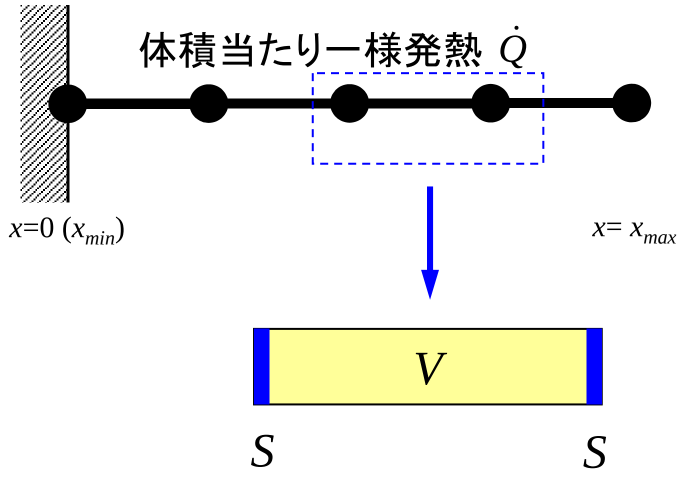
$$
-\int_S \bar{q}[N]^T dS + \int_V \dot{Q}[N]^T dV = 0
$$

- 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）

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

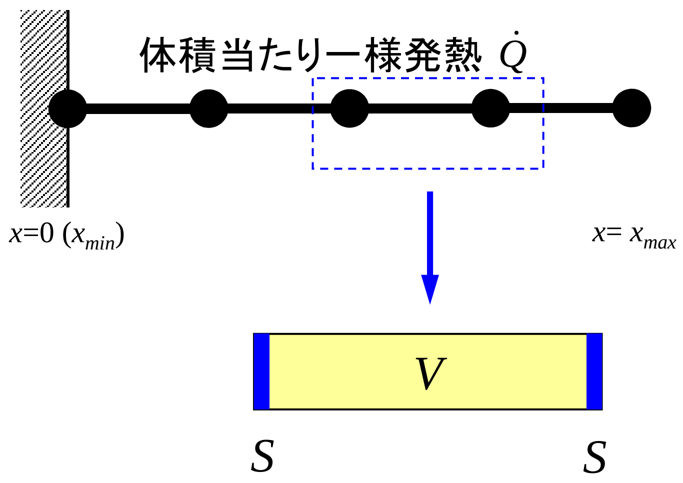
$$\boxed{-\int_S \bar{q}[N]^T dS} + \int_V \dot{Q}[N]^T dV = 0$$



- 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



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

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

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

境界条件を考慮した弱形式：各要素

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

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

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

要素単位での積分：$[k]$

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

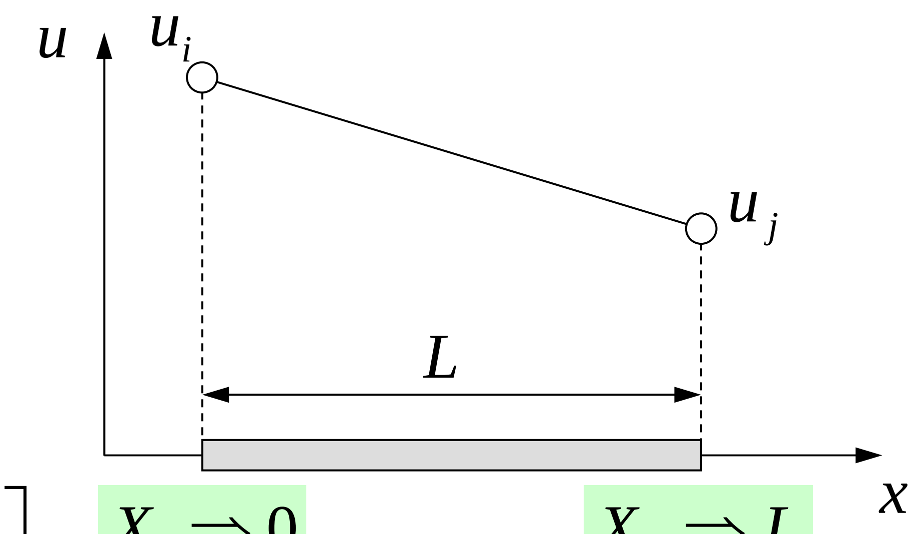
$$\int_V \lambda \left(\frac{d[N]^T}{dx} \frac{d[N]}{dx} \right) dV$$

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

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



$X_i \Rightarrow 0$　　$X_j \Rightarrow L$

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

要素単位での積分：{*f*}（1/2）

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

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

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

体積当たり発熱

1 : 1

A: 断面積, L: 要素長さ

要素単位での積分：{f}（2/2）

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

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

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と

全体方程式

- 要素単位の方程式を全体で足し合わせ，

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

$$[K]\cdot\{\Phi\} = \{F\}$$ 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-c.tar

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

```
>$ cd
>$ tar xvf fem-c.tar

>$ cd fem-c
```

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

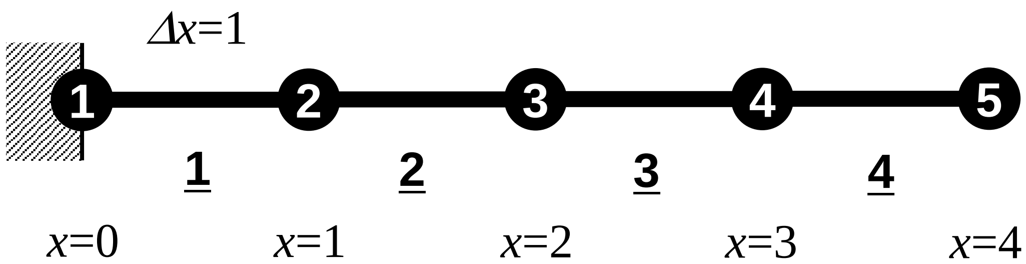
OBCX

実行（Cygwinではa.exe）

```
>$ cd <$P-TOP>/1d
>$ cc -O 1d.c
>$ ./a.out
```

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（CG法後述）
1.e-8	CG法の反復打切誤差

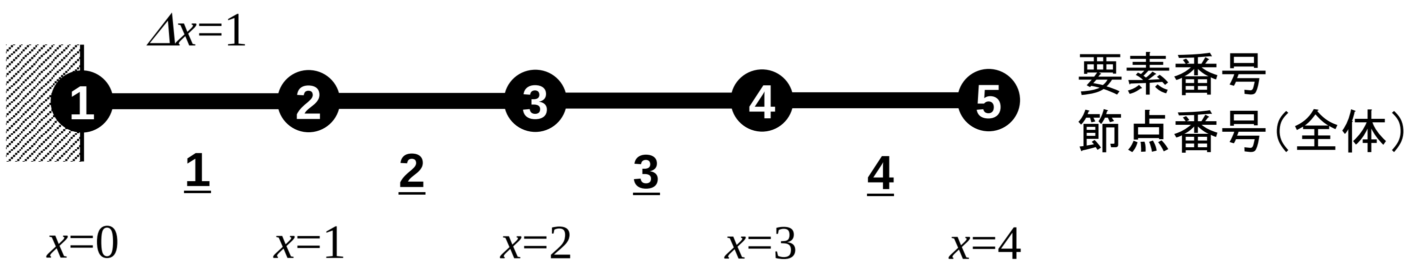


要素番号
節点番号（全体）

結果

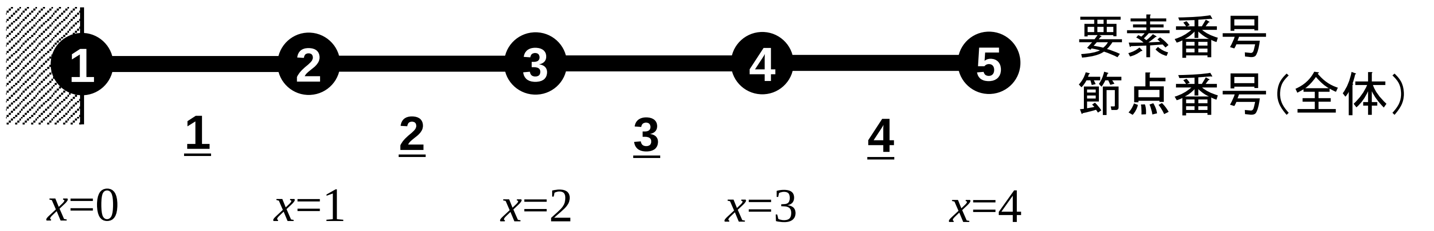
```
>$ ./a.out

   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：

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

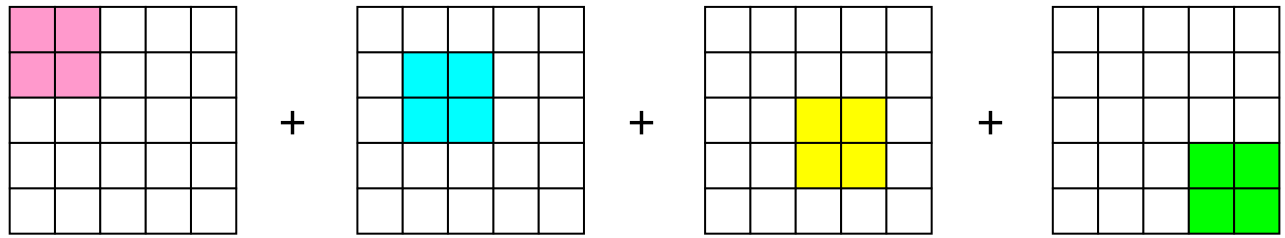
- 要素4については：

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

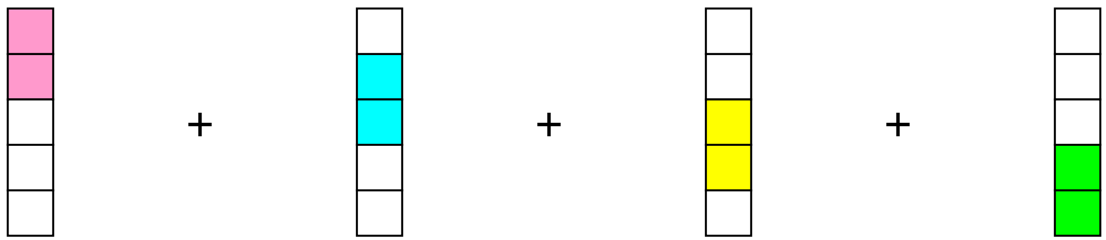
要素方程式とその重ね合わせ（2/3）

- 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

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

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

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

$$-\int_V \left(\frac{d^2T}{dx^2}\right) dV = -\int_V \left(\frac{T_{i+1} - 2T_i + T_{i-1}}{L^2}\right) dV$$

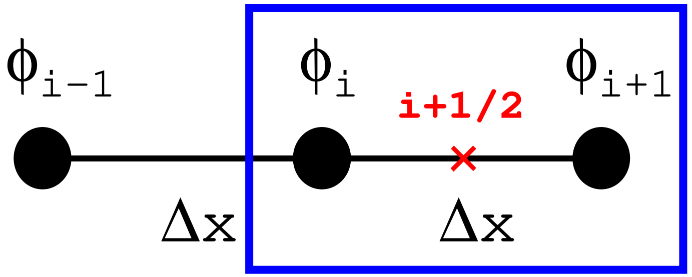
$$= -\left(\frac{T_{i+1} - 2T_i + T_{i-1}}{L^2}\right) \cdot AL = -\left(T_{i+1} - 2T_i + T_{i-1}\right) \cdot \frac{A}{L}$$

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

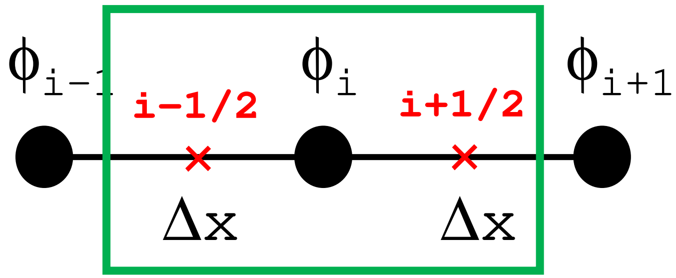
- ×（iとi+1の中点）における微分係数



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

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



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

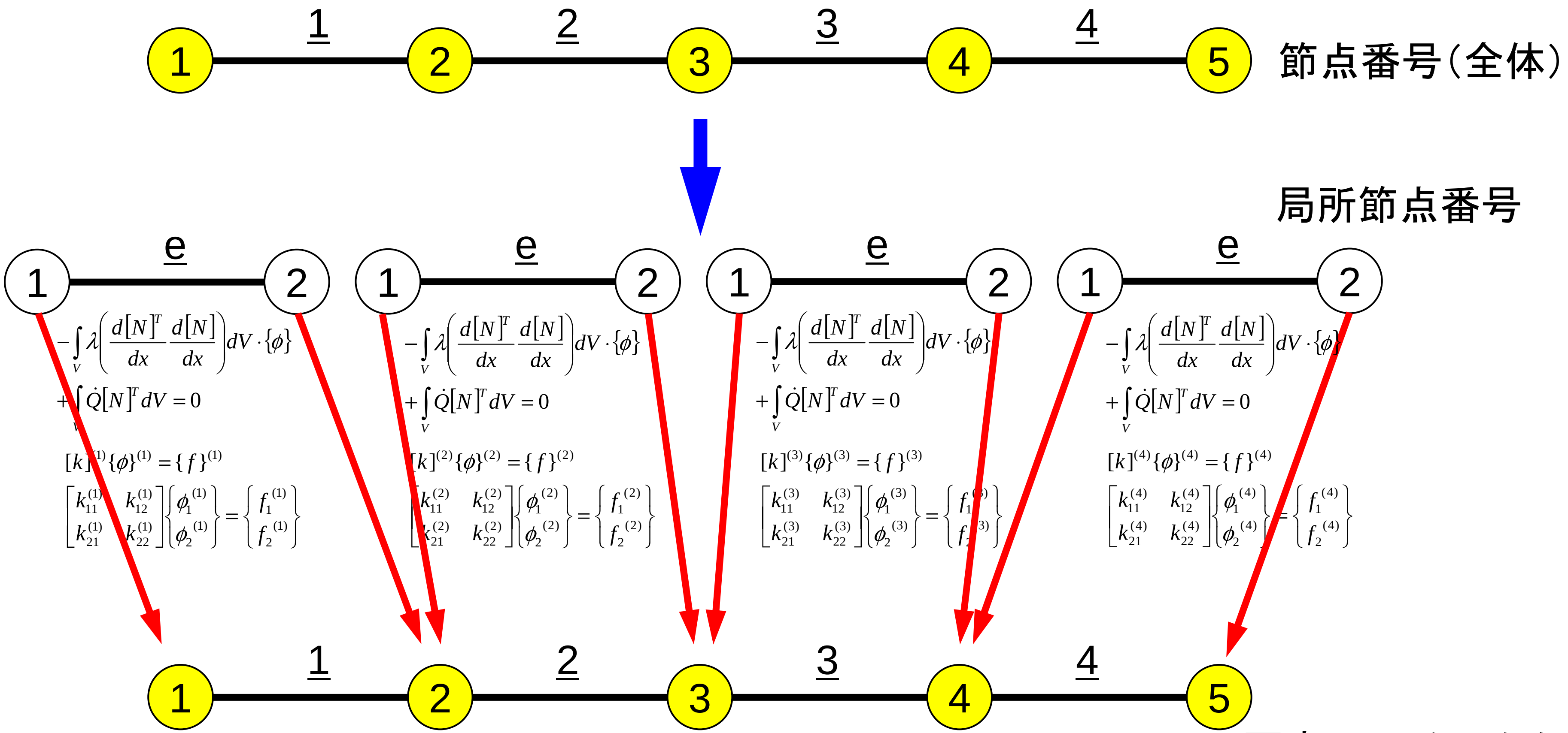
要素ごとに物性，寸法が異なっても簡単に対応が可能

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

$$[K] = \sum_{e=1}^{4} \left[k^{(e)}\right] = \begin{bmatrix} +1 & -1 & & & \\ -1 & +1 & & & \\ & & & & \\ & & & & \\ & & & & \end{bmatrix} \times \frac{\lambda^{(1)} A^{(1)}}{L^{(1)}} + \begin{bmatrix} & & & & \\ & +1 & -1 & & \\ & -1 & +1 & & \\ & & & & \\ & & & & \end{bmatrix} \times \frac{\lambda^{(2)} A^{(2)}}{L^{(2)}}$$

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

要素処理と全体処理



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

$$[k]^{(1)}\{\phi\}^{(1)}=\{f\}^{(1)}$$

$$\begin{bmatrix} k_{11}^{(1)} & k_{12}^{(1)} \\ k_{21}^{(1)} & k_{22}^{(1)} \end{bmatrix}\begin{Bmatrix} \phi_1^{(1)} \\ \phi_2^{(1)} \end{Bmatrix}=\begin{Bmatrix} f_1^{(1)} \\ f_2^{(1)} \end{Bmatrix}$$

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

$$[k]^{(2)}\{\phi\}^{(2)}=\{f\}^{(2)}$$

$$\begin{bmatrix} k_{11}^{(2)} & k_{12}^{(2)} \\ k_{21}^{(2)} & k_{22}^{(2)} \end{bmatrix}\begin{Bmatrix} \phi_1^{(2)} \\ \phi_2^{(2)} \end{Bmatrix}=\begin{Bmatrix} f_1^{(2)} \\ f_2^{(2)} \end{Bmatrix}$$

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

$$[k]^{(3)}\{\phi\}^{(3)}=\{f\}^{(3)}$$

$$\begin{bmatrix} k_{11}^{(3)} & k_{12}^{(3)} \\ k_{21}^{(3)} & k_{22}^{(3)} \end{bmatrix}\begin{Bmatrix} \phi_1^{(3)} \\ \phi_2^{(3)} \end{Bmatrix}=\begin{Bmatrix} f_1^{(3)} \\ f_2^{(3)} \end{Bmatrix}$$

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

$$[k]^{(4)}\{\phi\}^{(4)}=\{f\}^{(4)}$$

$$\begin{bmatrix} k_{11}^{(4)} & k_{12}^{(4)} \\ k_{21}^{(4)} & k_{22}^{(4)} \end{bmatrix}\begin{Bmatrix} \phi_1^{(4)} \\ \phi_2^{(4)} \end{Bmatrix}=\begin{Bmatrix} f_1^{(4)} \\ f_2^{(4)} \end{Bmatrix}$$

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

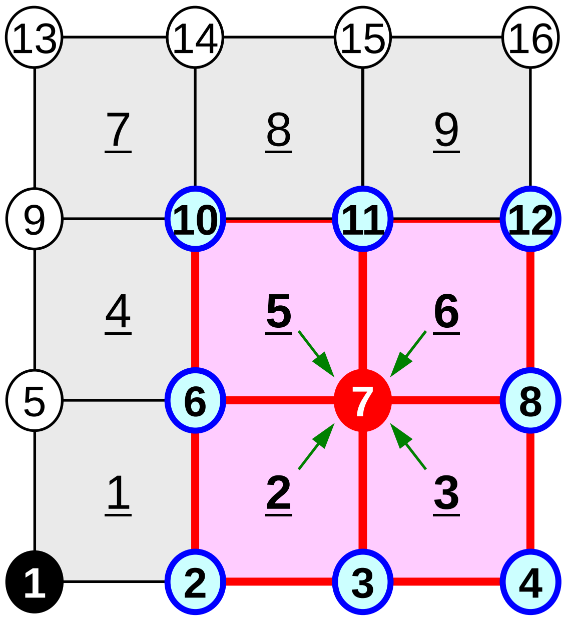
$$\begin{bmatrix} D_1 & AU_{11} & & & \\ AL_{21} & D_2 & AU_{21} & & \\ & AL_{31} & D_3 & AU_{31} & \\ & & AL_{41} & D_4 & AU_{41} \\ & & & AL_{51} & D_5 \end{bmatrix}\begin{Bmatrix} \Phi_1 \\ \Phi_2 \\ \Phi_3 \\ \Phi_4 \\ \Phi_5 \end{Bmatrix}=\begin{Bmatrix} B_1 \\ B_2 \\ B_3 \\ B_4 \\ B_5 \end{Bmatrix}$$

要素マトリクスから
全体マトリクスへの
マッピングを考える
必要がある。

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



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

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

- 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

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

$$\mathbf{A} \qquad \mathbf{x} \qquad \mathbf{b}$$

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

$$\mathbf{x}^{(1)}, \mathbf{x}^{(2)}, \cdots$$

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$\mathbf{x_0}$, $\mathbf{x_1}$, $\mathbf{x_2}$, ..., $\mathbf{x_k}$を求める:

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

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

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

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

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:

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

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
  - （ガラーキン法）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
  - $\mathbf{x}^{(i)}= \mathbf{x}^{(i-1)} + \alpha_i \mathbf{p}^{(i)}$
    - $x^{(i)}$：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）

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

共役勾配法のアルゴリズム

```
Compute r(0)= b-[A]x(0)
for i= 1, 2, …
    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) + αip(i)
    r(i)= r(i-1) - αiq(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, …
    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) + αip(i)
    r(i)= r(i-1) - αiq(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, …
    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) + αip(i)
    r(i)= r(i-1) - αiq(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, …
    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) + αip(i)
    r(i)= r(i-1) - αiq(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, …
    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) + αip(i)
    r(i)= r(i-1) - αiq(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：

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

$$(x-y)^T[A](x-y)=(x,Ax)-(y,Ax)-(x,Ay)+(y,Ay)$$
$$=(x,Ax)-2(x,Ay)+(y,Ay)=(x,Ax)-2(x,b)+\underline{(y,b)}$$

定数

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

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

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

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

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

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

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：

$$f\left(x^{(k)} + \alpha_k p^{(k)}\right) = \frac{1}{2}\alpha_k^{\ 2}\left(p^{(k)}, Ap^{(k)}\right) - \alpha_k\left(p^{(k)}, b - Ax^{(k)}\right) + f\left(x^{(k)}\right)$$

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

$r^{(k)} = b - Ax^{(k)}$ 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:

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

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

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

探索方向を以下の漸化式によって求める:

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

本当のところは下記のように(k+1)回目に厳密解 y が求ま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:

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

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

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

従って以下が成立する:

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

CG法アルゴリズムの導出(5/5)

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

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

$\left(p^{(k+1)}, Ap^{(k)}\right) = 0$　$p^{(k)}$ 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, …
    calc. αi-1
    x(i)= x(i-1) + αi-1p(i-1)
    r(i)= r(i-1) - αi-1[A]p(i-1)

    check convergence |r|
    (if not converged)
    calc. βi-1
    p(i)= r(i) + βi-1 p(i-1)
end
```

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

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

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:

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

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:

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

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 ⇒ 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

$$\left(r^{(i)}, r^{(j)}\right) = 0 \; (i \neq j)$$ 直交性

$$\left(p^{(i)}, Ap^{(j)}\right) = 0 \; (i \neq j)$$ 共役性

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

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

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

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

Proof (2/3)

Mathematical Induction
数学的帰納法

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

$(\ast)$ is satisfied for $i \le k,\ j \le k$ where $i \neq j$

<u>if $i < k$</u>

$$\left(r^{(k+1)}, r^{(i)}\right) = \left(r^{(i)}, r^{(k+1)}\right) \overset{(2)}{=} \left(r^{(i)}, r^{(k)} - \alpha_k Ap^{(k)}\right)$$
$$\overset{(\ast)}{=} -\alpha_k \left(r^{(i)}, Ap^{(k)}\right) \overset{(3)}{=} -\alpha_k \left(p^{(i)} - \beta_{i-1} p^{(i-1)}, Ap^{(k)}\right)$$
$$= -\alpha_k \left(p^{(i)}, Ap^{(k)}\right) + \alpha_k \beta_{i-1} \left(p^{(i-1)}, Ap^{(k)}\right) \overset{(\ast)}{=} 0$$

<u>if $i = k$</u>

$$\left(r^{(k+1)}, r^{(k)}\right) \overset{(2)}{=} \left(r^{(k)}, r^{(k)}\right) - \left(r^{(k)}, \alpha_k Ap^{(k)}\right)$$
$$\overset{(3)}{=} \left(r^{(k)}, r^{(k)}\right) - \left(p^{(k)} - \beta_{k-1} p^{(k-1)}, \alpha_k Ap^{(k)}\right)$$
$$\overset{(\ast)}{=} \left(r^{(k)}, r^{(k)}\right) - \alpha_k \left(p^{(k)}, Ap^{(k)}\right) \overset{(1)}{=} \left(r^{(k)}, r^{(k)}\right) - \left(p^{(k)}, r^{(k)}\right)$$
$$\overset{(3)}{=} \left(r^{(k)}, r^{(k)}\right) - \left(\beta_{k-1} p^{(k-1)} + r^{(k)}, r^{(k)}\right)$$
$$= -\beta_{k-1} \left(p^{(k-1)}, r^{(k)}\right) \overset{(2)}{=} -\beta_{k-1} \left(p^{(k-1)}, r^{(k-1)} - \alpha_{k-1} Ap^{(k-1)}\right)$$
$$= -\beta_{k-1} \left\{\left(p^{(k-1)}, r^{(k-1)}\right) - \alpha_{k-1} \left(p^{(k-1)}, Ap^{(k-1)}\right)\right\} \overset{(1)}{=} 0$$

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

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

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

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

Proof (3/3)

Mathematical Induction
数学的帰納法

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

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

<u>if $i < k$</u>

$$\left(p^{(k+1)}, Ap^{(i)}\right) \overset{(3)}{=} \left(r^{(k+1)} + \beta_k p^{(k)}, Ap^{(i)}\right)$$
$$\overset{(*)}{=} \left(r^{(k+1)}, Ap^{(i)}\right)$$
$$\overset{(2)}{=} \frac{1}{\alpha_i}\left(r^{(k+1)}, r^{(i)} - r^{(i+1)}\right) = 0$$

<u>if $i = k$</u>

$$\left(p^{(k+1)}, Ap^{(k)}\right) \overset{(3)}{=} \left(r^{(k+1)}, Ap^{(k)}\right) + \beta_k \left(p^{(k)}, Ap^{(k)}\right)$$
$$\overset{(4)}{=} 0$$

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$\alpha_k, \ \beta_k$

実際は$\alpha_k, \ \beta_k$はもうちょっと簡単な形に変形できる:

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

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

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

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

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, …
    ρi-1= r(i-1) r(i-1)
    if i=1
      p(1)= r(0)
     else
      βi-1= ρi-1/ρi-2
      p(i)= r(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) + αip(i)
    r(i)= r(i-1) - αiq(i)
    check convergence |r|
end
```

$x^{(i)}$: Vector

α_i : Scalar

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

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

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, …
    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) + αip(i)
    r(i)= r(i-1) - αiq(i)
    check convergence |r|
end
```

$[\mathbf{M}] = [\mathbf{M}_1][\mathbf{M}_2]$

$[\mathbf{A}']\mathbf{x}' = \mathbf{b}'$

$[\mathbf{A}'] = [\mathbf{M}_1]^{-1}[\mathbf{A}][\mathbf{M}_2]^{-1}$

$\mathbf{x}' = [\mathbf{M}_2]\mathbf{x},\quad \mathbf{b}' = [\mathbf{M}_1]^{-1}\mathbf{b}$

$\mathbf{p}' \Rightarrow [\mathbf{M}_2]\mathbf{p},\quad \mathbf{r}' \Rightarrow [\mathbf{M}_1]^{-1}\mathbf{r}$

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

$[\mathbf{M}_2]\mathbf{p}^{(i)} = [\mathbf{M}_1]^{-1}\mathbf{r}^{(i-1)} + \beta'_{i-1}\,[\mathbf{M}_2]\mathbf{p}^{(i-1)}$

$\mathbf{p}^{(i)} = [\mathbf{M}_2]^{-1}[\mathbf{M}_1]^{-1}\mathbf{r}^{(i-1)} + \beta'_{i-1}\,\mathbf{p}^{(i-1)}$

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

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

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

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:

$$[\mathrm{M}_1]=[\mathrm{X}]^T,[\mathrm{M}_2]=[\mathrm{X}],[\mathrm{M}]=[\mathrm{M}_1][\mathrm{M}_2]$$

$$[\mathrm{A}']x'=b'$$

$$[\mathrm{A}']=[\mathrm{M}_1]^{-1}[\mathrm{A}][\mathrm{M}_2]^{-1}=[[\mathrm{X}]^T]^{-1}[\mathrm{A}][\mathrm{X}]^{-1}=[\mathrm{X}]^{-T}[\mathrm{A}][\mathrm{X}]^{-1}$$

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

$$\alpha'_{i-1}=\frac{\left(r'^{(i-1)},r'^{(i-1)}\right)}{\left(p'^{(i-1)},A'p'^{(i-1)}\right)}=\frac{\left([\mathrm{X}]^{-T}r^{(i-1)},[\mathrm{X}]^{-T}r^{(i-1)}\right)}{\left([\mathrm{X}]p^{(i-1)},[\mathrm{X}]^{-T}[\mathrm{A}][\mathrm{X}]^{-1}[\mathrm{X}]p^{(i-1)}\right)}$$

$$=\frac{\left(\left([\mathrm{X}]^{-T}r^{(i-1)}\right)^T,[\mathrm{X}]^{-T}r^{(i-1)}\right)}{\left(\left([\mathrm{X}]p^{(i-1)}\right)^T,[\mathrm{X}]^{-T}[\mathrm{A}]p^{(i-1)}\right)}=\frac{\left(\left(r^{(i-1)}\right)^T[\mathrm{X}]^{-1},\left[\mathrm{X}^T\right]^{-1}r^{(i-1)}\right)}{\left(\left(p^{(i-1)}\right)^T[\mathrm{X}]^T,[\mathrm{X}]^{-T}[\mathrm{A}]p^{(i-1)}\right)}$$

$$=\frac{\left(r^{(i-1)},\left[\left[\mathrm{X}^T\right][\mathrm{X}]\right]^{-1}r^{(i-1)}\right)}{\left(p^{(i-1)},[\mathrm{A}]p^{(i-1)}\right)}=\frac{\left(r^{(i-1)},[\mathrm{M}]^{-1}r^{(i-1)}\right)}{\left(p^{(i-1)},[\mathrm{A}]p^{(i-1)}\right)}=\frac{\left(r^{(i-1)},z^{(i-1)}\right)}{\left(p^{(i-1)},[\mathrm{A}]p^{(i-1)}\right)}$$

$$\beta'_{i-1} = \frac{\left(r'^{(i-1)}, r'^{(i-1)}\right)}{\left(r'^{(i-2)}, r'^{(i-2)}\right)} == \frac{\left([\mathrm{X}]^{-T} r^{(i-1)}, [\mathrm{X}]^{-T} r^{(i-1)}\right)}{\left([\mathrm{X}]^{-T} r^{(i-2)}, [\mathrm{X}]^{-T} r^{(i-2)}\right)}$$

$$= \frac{\left(\left([\mathrm{X}]^{-T} r^{(i-1)}\right)^{T}, [\mathrm{X}]^{-T} r^{(i-1)}\right)}{\left(\left([\mathrm{X}]^{-T} r^{(i-2)}\right)^{T}, [\mathrm{X}]^{-T} r^{(i-2)}\right)} = \frac{\left(\left(r^{(i-1)}\right)^{T} [\mathrm{X}]^{-1}, \left[\mathrm{X}^{T}\right]^{-1} r^{(i-1)}\right)}{\left(\left(r^{(i-2)}\right)^{T} [\mathrm{X}]^{-1}, \left[\mathrm{X}^{T}\right]^{-1} r^{(i-2)}\right)}$$

$$= \frac{\left(r^{(i-1)}, \left[\left[\mathrm{X}^{T}\right][\mathrm{X}]\right]^{-1} r^{(i-1)}\right)}{\left(r^{(i-2)}, \left[\left[\mathrm{X}^{T}\right][\mathrm{X}]\right]^{-1} r^{(i-2)}\right)} = \frac{\left(r^{(i-1)}, [\mathrm{M}]^{-1} r^{(i-1)}\right)}{\left(r^{(i-2)}, [\mathrm{M}]^{-1} r^{(i-2)}\right)} = \frac{\left(r^{(i-1)}, z^{(i-1)}\right)}{\left(r^{(i-2)}, z^{(i-2)}\right)}$$

前処理付き共役勾配法

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

下記の方程式を解く:

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

近似逆行列

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

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]z$^{(i-1)}$= 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

有限要素法で得られるマトリクス

- 疎行列
  - 0が多い
- $A(i,j)$のように正方行列の全成分を記憶することは疎行列では非効率的
  - 「密」行列向け

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

- 有限要素法：非零非対角成分の数は高々「数百」規模
  - 例えば未知数が10^8個あるとすると記憶容量（ワード数）は
    - 正方行列：$O(10^{16})$ ~ $O(10^{17})$ bytes for DP: 100PB (100x K computer)
    - 非零非対角成分数：$O(10^{10})$：100GB
- **非零成分のみ記憶するのが効率的**

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，[N]）
Index[i]	非対角成分数に関する一次元配列（通し番号）（整数，[N+1]）
Item[k]	非対角成分の要素（列）番号（整数，[Index[N]]）
AMat[k]	非対角成分（実数，[Index[N]]）

```
{Y}=[A]{X}

for(i=0;i<N;i++){
        Y[i] = Diag[i] * X[i];
        for(k=Index[i];k<Index[i+1];k++){
                Y[i] += AMat[k]*X[Item[k]];
        }
}
```

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

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}

for (i=0;j<N;j++){
  Y[i]= 0.d0;
  for (j=0;j<N;j++){
    Y[i]= Y[i] + A[i][j]*X[j]
  }
}
```

Compressed Row Storage (CRS)

$$
\begin{array}{cc}
 & \begin{array}{cccccccc} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 & 8 \end{array} \\
\begin{array}{c} 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \\ 5 \\ 6 \\ 7 \\ 8 \end{array} &
\begin{bmatrix}
1.1 & 2.4 & 0 & 0 & 3.2 & 0 & 0 & 0 \\
4.3 & 3.6 & 0 & 2.5 & 0 & 3.7 & 0 & 9.1 \\
0 & 0 & 5.7 & 0 & 1.5 & 0 & 3.1 & 0 \\
0 & 4.1 & 0 & 9.8 & 2.5 & 2.7 & 0 & 0 \\
3.1 & 9.5 & 10.4 & 0 & 11.5 & 0 & 4.3 & 0 \\
0 & 0 & 6.5 & 0 & 0 & 12.4 & 9.5 & 0 \\
0 & 6.4 & 2.5 & 0 & 0 & 1.4 & 23.1 & 13.1 \\
0 & 9.5 & 1.3 & 9.6 & 0 & 3.1 & 0 & 51.3
\end{bmatrix}
\end{array}
$$

Compressed Row Storage (CRS)
Cでは0番から番号付け

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

```
N= 8
```

対角成分

```
Diag[0]=  1.1
Diag[1]=  3.6
Diag[2]=  5.7
Diag[3]=  9.8
Diag[4]= 11.5
Diag[5]= 12.4
Diag[6]= 23.1
Diag[7]= 51.3
```

Compressed Row Storage (CRS)

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

Compressed Row Storage (CRS)

						非対角成分数	Index[0]= 0
0	1.1 ◎	2.4 ①	3.2 ④			2	Index[1]= 2
1	3.6 ①	4.3 ◎	2.5 ③	3.7 ⑤	9.1 ⑦	4	Index[2]= 6
2	5.7 ②	1.5 ④	3.1 ⑥			2	Index[3]= 8
3	9.8 ③	4.1 ①	2.5 ④	2.7 ⑤		3	Index[4]= 11
4	11.5 ④	3.1 ◎	9.5 ①	10.4 ②	4.3 ⑥	4	Index[5]= 15
5	12.4 ⑤	6.5 ②	9.5 ⑥			2	Index[6]= 17
6	23.1 ⑥	6.4 ①	2.5 ②	1.4 ⑤	13.1 ⑦	4	Index[7]= 21
7	51.3 ⑦	9.5 ①	1.3 ②	9.6 ③	3.1 ⑤	4	Index[8]= 25

NPLU= 25 (=Index[N])

Index[i]~Index[i+1]-1番目がi行目の非対角成分

Compressed Row Storage (CRS)

						非対角成分数	
							Index[0]= 0
0	1.1 ◎	2.4 ①,0	3.2 ④,1			2	Index[1]= 2
1	3.6 ①	4.3 ◎,2	2.5 ③,3	3.7 ⑤,4	9.1 ⑦,5	4	Index[2]= 6
2	5.7 ②	1.5 ④,6	3.1 ⑥,7			2	**Index[3]= 8**
3	9.8 ③	**4.1 ①,8**	**2.5 ④,9**	**2.7 ⑤,10**		**3**	**Index[4]= 11**
4	11.5 ④	3.1 ◎,11	9.5 ①,12	10.4 ②,13	4.3 ⑥,14	4	Index[5]= 15
5	12.4 ⑤	6.5 ②,15	9.5 ⑥,16			2	Index[6]= 17
6	23.1 ⑥	6.4 ①,17	2.5 ②,18	1.4 ⑤,19	13.1 ⑦,20	4	Index[7]= 21
7	51.3 ⑦	9.5 ①,21	1.3 ②,22	9.6 ③,23	3.1 ⑤,24	4	Index[8]= 25

NPLU= 25
(=Index[N])

Index[i]~Index[i+1]-1番目がi行目の非対角成分

Compressed Row Storage (CRS)

0	1.1 ◎	2.4 ①,0	3.2 ④,1		
1	3.6 ①	4.3 ◎,2	2.5 ③,3	3.7 ⑤,4	9.1 ⑦,5
2	5.7 ②	**1.5 ④,6**	3.1 ⑥,7		
3	9.8 ③	4.1 ①,8	2.5 ④,9	2.7 ⑤,10	
4	11.5 ④	3.1 ◎,11	9.5 ①,12	10.4 ②,13	4.3 ⑥,14
5	12.4 ⑤	6.5 ②,15	9.5 ⑥,16		
6	23.1 ⑥	6.4 ①,17	**2.5 ②,18**	1.4 ⑤,19	13.1 ⑦,20
7	51.3 ⑦	9.5 ①,21	1.3 ②,22	9.6 ③,23	3.1 ⑤,24

例:

```
Item[ 6]= 4, AMat[ 6]= 1.5
Item[18]= 2, AMat[18]= 2.5
```

Compressed Row Storage (CRS)

0	1.1 ◎	2.4 ①,0	3.2 ④,1		
1	3.6 ①	4.3 ◎,2	2.5 ③,3	3.7 ⑤,4	9.1 ⑦,5
2	5.7 ②	1.5 ④,6	3.1 ⑥,7		
3	9.8 ③	4.1 ①,8	2.5 ④,9	2.7 ⑤,10	
4	11.5 ④	3.1 ◎,11	9.5 ①,12	10.4 ②,13	4.3 ⑥,14
5	12.4 ⑤	6.5 ②,15	9.5 ⑥,16		
6	23.1 ⑥	6.4 ①,17	2.5 ②,18	1.4 ⑤,19	13.1 ⑦,20
7	51.3 ⑦	9.5 ①,21	1.3 ②,22	9.6 ③,23	3.1 ⑤,24

Diag [i]	対角成分(実数, [N])
Index[i]	非対角成分数に関する一次元配列 (通し番号)(整数, [N+1])
Item[k]	非対角成分の要素(列)番号 (整数, [Index[N]])
AMat[k]	非対角成分 (実数, [Index[N]])

```
{Y}=[A]{X}

for(i=0;i<N;i++){
    Y[i] = Diag[i] * X[i];
    for(k=Index[i];k<Index[i+1];k++){
        Y[i] += AMat[k]*X[Item[k]];
      }
}
```

- 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.c（1/6）
諸変数

```
/*
//   1D Steady-State Heat Transfer
//   FEM with Piece-wise Linear Elements
//   CG (Conjugate Gradient) Method
//
//   d/dx(CdT/dx) + Q = 0
//   T=0@x=0
*/
#include <stdio.h>
#include <stdlib.h>
#include <math.h>
#include <assert.h>

int main(){
        int NE, N, NPLU, IterMax;
        int R, Z, Q, P, DD;

        double dX, Resid, Eps, Area, QV, COND;
        double X1, X2, U1, U2, DL, Strain, Sigma, Ck;
        double QN, XL, C2, Xi, PHIa;
        double *PHI, *Rhs, *X;
        double *Diag, *AMat;
        double **W;
        int *Index, *Item, *Icelnod;
        double Kmat[2][2], Emat[2][2];
        int i, j, in1, in2, k, icel, k1, k2, jS;
        int iter;
        FILE *fp;
        double BNorm2, Rho, Rho1=0.0, C1, Alpha, DNorm2;
        int ierr  = 1;
        int errno = 0;
```

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
errno	I		O	エラー戻り値
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	[4][N]	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	N+1	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

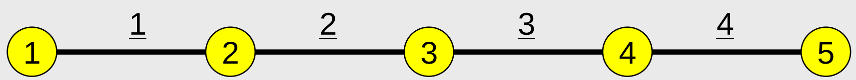
プログラム：1d.c（2/6）

初期設定，配列宣言

```
/*
// +-------+
// | INIT. |
// +-------+
*/
      fp = fopen("input.dat", "r");
      assert(fp != NULL);
      fscanf(fp, "%d", &NE);
      fscanf(fp, "%lf %lf %lf %lf", &dX, &QV, &Area, &COND);
      fscanf(fp, "%d", &IterMax);
      fscanf(fp, "%lf", &Eps);
      fclose(fp);

      N= NE + 1;

      PHI  = calloc(N, sizeof(double));
      X    = calloc(N, sizeof(double));
      Diag = calloc(N, sizeof(double));

      AMat = calloc(2*N-2, sizeof(double));

      Rhs  = calloc(N, sizeof(double));

      Index= calloc(N+1, sizeof(int));
      Item = calloc(2*N-2, sizeof(int));

      Icelnod= calloc(2*NE, sizeof(int));
```

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
```



NE：　要素数
N：　節点数 （=NE+1）

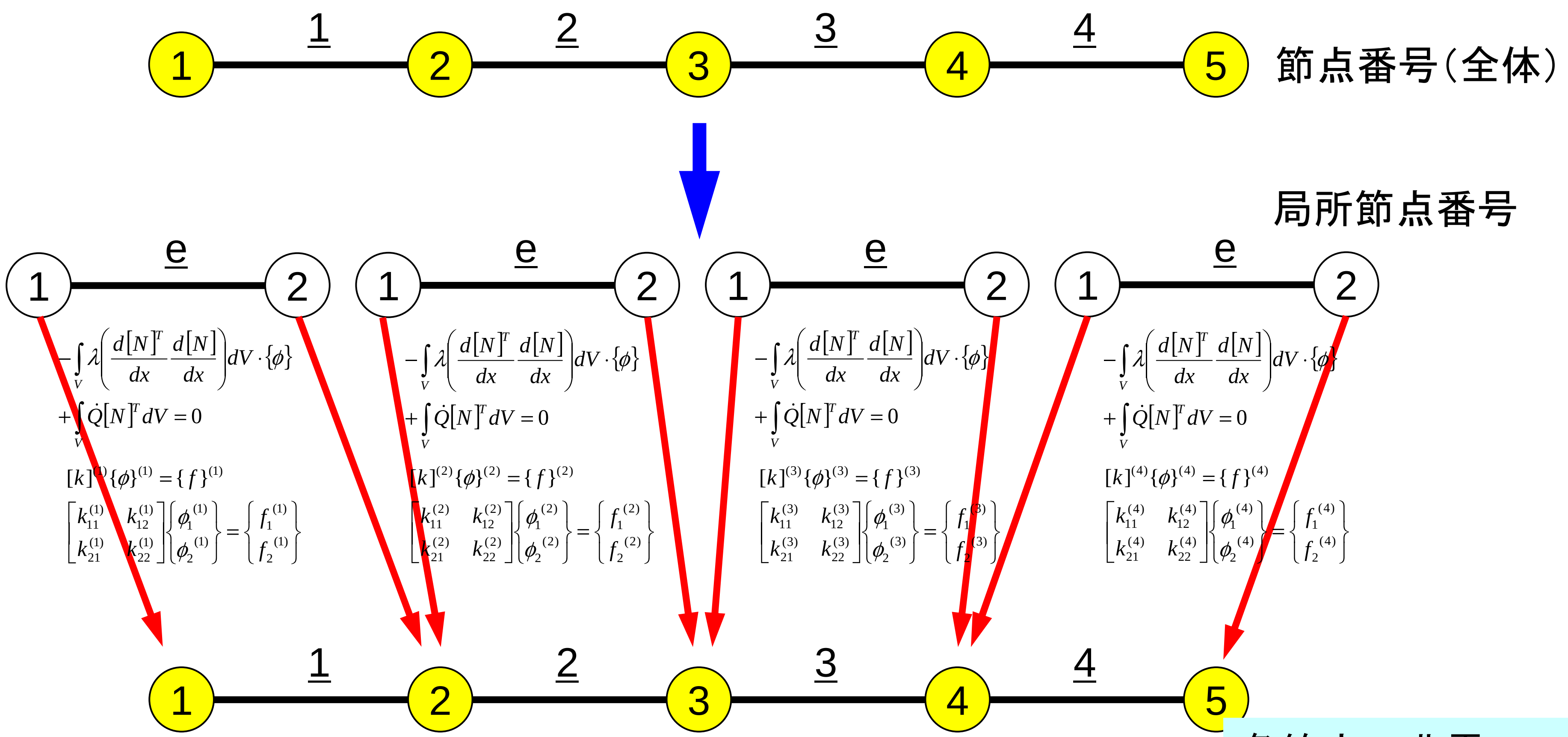
プログラム：1d.c（2/6）

初期設定，配列宣言

```
/*
// +-------+
// | INIT. |
// +-------+
*/
        fp = fopen("input.dat", "r");
        assert(fp != NULL);
        fscanf(fp, "%d", &NE);
        fscanf(fp, "%lf %lf %lf %lf", &dX, &QV, &Area, &COND);
        fscanf(fp, "%d", &IterMax);
        fscanf(fp, "%lf", &Eps);
        fclose(fp);

        N= NE + 1;

        PHI  = calloc(N, sizeof(double));
        X    = calloc(N, sizeof(double));
        Diag = calloc(N, sizeof(double));

        AMat = calloc(2*N-2, sizeof(double));

        Rhs = calloc(N, sizeof(double));

        Index= calloc(N+1, sizeof(int));
        Item = calloc(2*N-2, sizeof(int));

        Icelnod= calloc(2*NE, sizeof(int));
```

Amat： 非零非対角成分
Item： 対応する列番号

要素処理と全体処理



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

$$[k]^{(1)}\{\phi\}^{(1)} = \{f\}^{(1)}$$

$$\begin{bmatrix} k_{11}^{(1)} & k_{12}^{(1)} \\ k_{21}^{(1)} & k_{22}^{(1)} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \phi_1^{(1)} \\ \phi_2^{(1)} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} f_1^{(1)} \\ f_2^{(1)} \end{Bmatrix}$$

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

$$[k]^{(2)}\{\phi\}^{(2)} = \{f\}^{(2)}$$

$$\begin{bmatrix} k_{11}^{(2)} & k_{12}^{(2)} \\ k_{21}^{(2)} & k_{22}^{(2)} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \phi_1^{(2)} \\ \phi_2^{(2)} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} f_1^{(2)} \\ f_2^{(2)} \end{Bmatrix}$$

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

$$[k]^{(3)}\{\phi\}^{(3)} = \{f\}^{(3)}$$

$$\begin{bmatrix} k_{11}^{(3)} & k_{12}^{(3)} \\ k_{21}^{(3)} & k_{22}^{(3)} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \phi_1^{(3)} \\ \phi_2^{(3)} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} f_1^{(3)} \\ f_2^{(3)} \end{Bmatrix}$$

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

$$[k]^{(4)}\{\phi\}^{(4)} = \{f\}^{(4)}$$

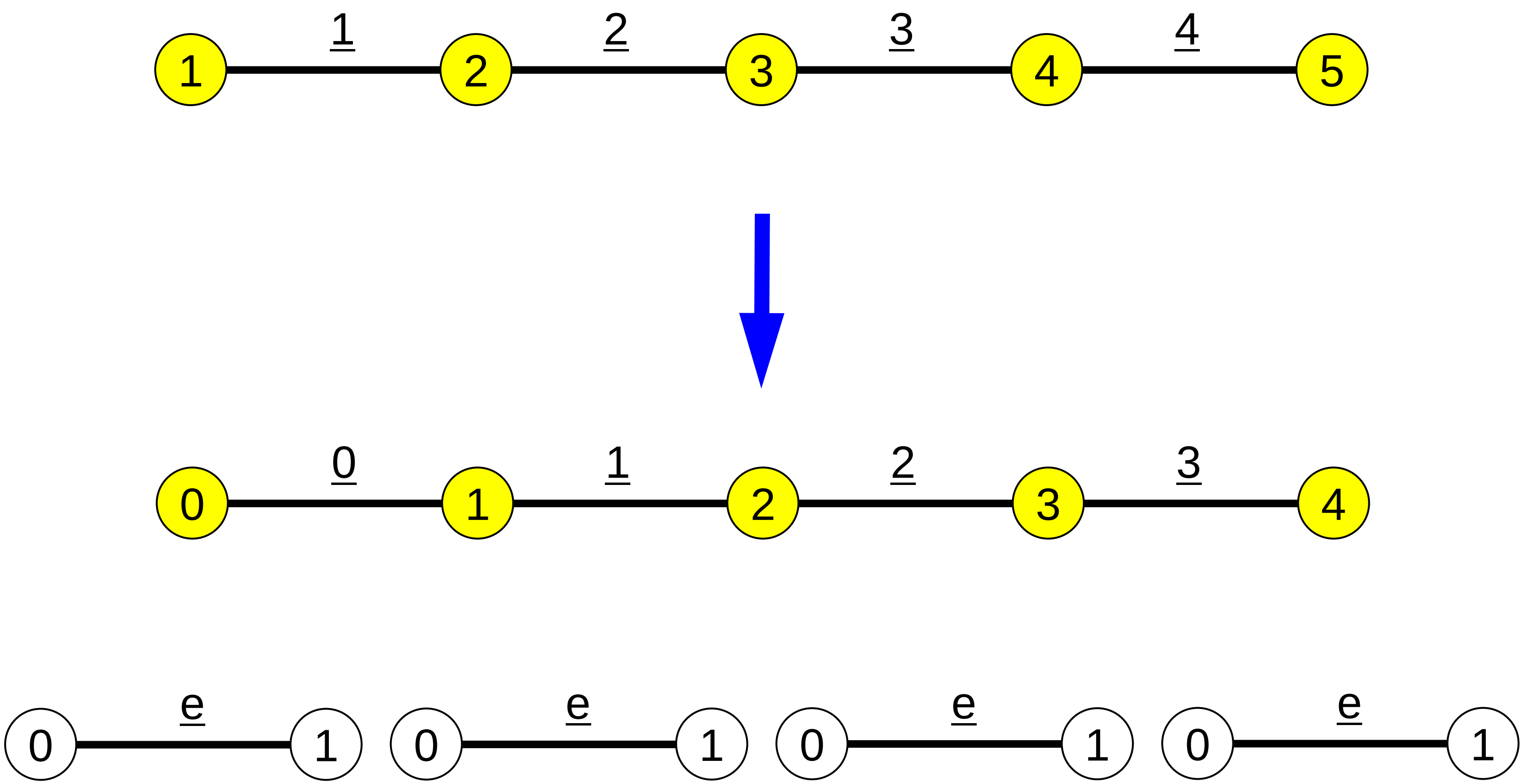
$$\begin{bmatrix} k_{11}^{(4)} & k_{12}^{(4)} \\ k_{21}^{(4)} & k_{22}^{(4)} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \phi_1^{(4)} \\ \phi_2^{(4)} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} f_1^{(4)} \\ f_2^{(4)} \end{Bmatrix}$$

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

$$\begin{bmatrix} D_1 & AU_{11} & & & \\ AL_{21} & D_2 & AU_{21} & & \\ & AL_{31} & D_3 & AU_{31} & \\ & & AL_{41} & D_4 & AU_{41} \\ & & & AL_{51} & D_5 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \Phi_1 \\ \Phi_2 \\ \Phi_3 \\ \Phi_4 \\ \Phi_5 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} B_1 \\ B_2 \\ B_3 \\ B_4 \\ B_5 \end{Bmatrix}$$

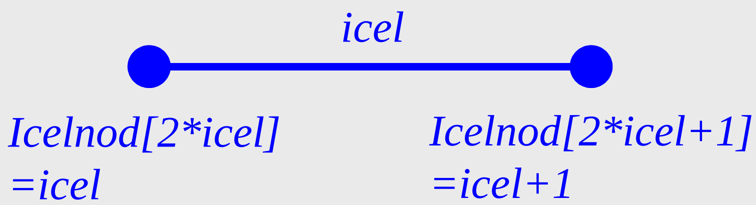
各節点の非零
非対角成分数
は「2」(ただし両端
では「1」)

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.c（2/6）
初期設定，配列宣言

```
/*
// +-------+
// | INIT. |
// +-------+
*/
        fp = fopen("input.dat", "r");
        assert(fp != NULL);
        fscanf(fp, "%d", &NE);
        fscanf(fp, "%lf %lf %lf %lf", &dX, &QV, &Area, &COND);
        fscanf(fp, "%d", &IterMax);
        fscanf(fp, "%lf", &Eps);
        fclose(fp);

        N= NE + 1;

        PHI  = calloc(N, sizeof(double));
        X    = calloc(N, sizeof(double));
        Diag = calloc(N, sizeof(double));

        AMat = calloc(2*N-2, sizeof(double));

        Rhs = calloc(N, sizeof(double));

        Index= calloc(N+1, sizeof(int));
        Item = calloc(2*N-2, sizeof(int));

        Icelnod= calloc(2*NE, sizeof(int));
```



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.c（3/6）
配列宣言（続き），初期化

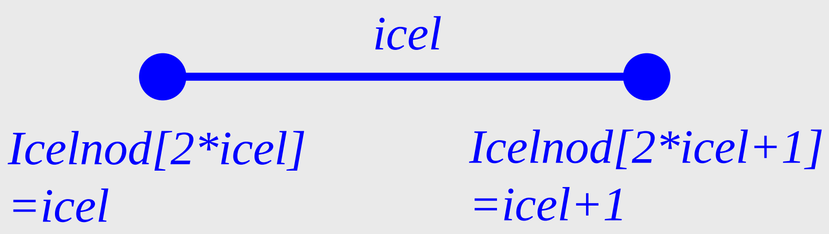
```
W = (double **)malloc(sizeof(double *)*4);
if(W == NULL) {
  fprintf(stderr, "Error: %s¥n", strerror(errno));
  return -1;
}
for(i=0; i<4; i++) {
  W[i] = (double *)malloc(sizeof(double)*N);
  if(W[i] == NULL) {
    fprintf(stderr, "Error: %s¥n", strerror(errno));
    return -1;
  }
}

for(i=0;i<N;i++)  PHI[i] = 0.0;
for(i=0;i<N;i++) Diag[i] = 0.0;
for(i=0;i<N;i++)  Rhs[i] = 0.0;
for(k=0;k<2*N-2;k++)  AMat[k] = 0.0;

for(i=0;i<N;i++) X[i]= i*dX;

for(icel=0;icel<NE;icel++){
  Icelnod[2*icel  ]= icel;
  Icelnod[2*icel+1]= icel+1;
}

Kmat[0][0]= +1.0;
Kmat[0][1]= -1.0;
Kmat[1][0]= -1.0;
Kmat[1][1]= +1.0;
```

X：　各節点の座標

プログラム：1d.c（3/6）

配列宣言（続き），初期化

```
W = (double **)malloc(sizeof(double *)*4);
       if(W == NULL) {
         fprintf(stderr, "Error: %s¥n", strerror(errno));
         return -1;
       }
       for(i=0; i<4; i++) {
         W[i] = (double *)malloc(sizeof(double)*N);
         if(W[i] == NULL) {
           fprintf(stderr, "Error: %s¥n", strerror(errno));
           return -1;
         }
       }

       for(i=0;i<N;i++)  PHI[i] = 0.0;
       for(i=0;i<N;i++) Diag[i] = 0.0;
       for(i=0;i<N;i++)  Rhs[i] = 0.0;
       for(k=0;k<2*N-2;k++)  AMat[k] = 0.0;

       for(i=0;i<N;i++) X[i]= i*dX;

       for(icel=0;icel<NE;icel++){
         Icelnod[2*icel  ]= icel;
         Icelnod[2*icel+1]= icel+1;
       }

       Kmat[0][0]= +1.0;
       Kmat[0][1]= -1.0;
       Kmat[1][0]= -1.0;
       Kmat[1][1]= +1.0;
```



プログラム：1d.c（3/6）

配列宣言（続き），初期化

```
W = (double **)malloc(sizeof(double *)*4);
if(W == NULL) {
  fprintf(stderr, "Error: %s¥n", strerror(errno));
  return -1;
}
for(i=0; i<4; i++) {
  W[i] = (double *)malloc(sizeof(double)*N);
  if(W[i] == NULL) {
    fprintf(stderr, "Error: %s¥n", strerror(errno));
    return -1;
  }
}

for(i=0;i<N;i++)  PHI[i] = 0.0;
for(i=0;i<N;i++) Diag[i] = 0.0;
for(i=0;i<N;i++)  Rhs[i] = 0.0;
for(k=0;k<2*N-2;k++)  AMat[k] = 0.0;

for(i=0;i<N;i++) X[i]= i*dX;

for(icel=0;icel<NE;icel++){
  Icelnod[2*icel  ]= icel;
  Icelnod[2*icel+1]= icel+1;
}

Kmat[0][0]= +1.0;
Kmat[0][1]= -1.0;
Kmat[1][0]= -1.0;
Kmat[1][1]= +1.0;
```

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

[Kmat]

プログラム：1d.c（4/6）
全体マトリクス：非零非対角成分に対応する列番号

```
/*
// +----------------+
// | CONNECTIVITY |
// +----------------+
*/
  for(i=0;i<N+1;i++)  Index[i] = 2;
  Index[0]= 0;
  Index[1]= 1;
  Index[N]= 1;

  for(i=0;i<N;i++){
          Index[i+1]= Index[i+1] + Index[i];
          }

  NPLU= Index[N];

  for(i=0;i<N;i++){
          jS = Index[i];
          if(i == 0){
                    Item[jS] = i+1;
          }else if(i == N-1){
                    Item[jS] = i-1;
          }else{
                    Item[jS] = i-1;
                    Item[jS+1] = i+1;
          }
  }
```

各節点の非零非対角成分数は「2」
（ただし両端では「1」）

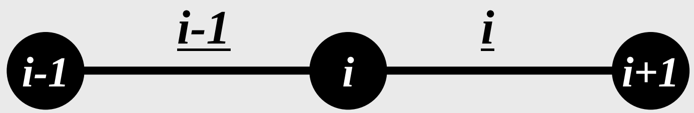
総数：2*(N-2)+1+1 = 2*N-2
Index[N]= 2*N-2 = NPLU

						非対角成分数	
							Index[0]= 0
0	1.1 ◎	2.4 ①,0	3.2 ④,1			2	Index[1]= 2
1	3.6 ①	4.3 ◎,2	2.5 ③,3	3.7 ⑤,4	9.1 ⑦,5	4	Index[2]= 6
2	5.7 ②	1.5 ④,6	3.1 ⑥,7			2	**Index[3]= 8**
3	9.8 ③	**4.1 ①,8**	**2.5 ④,9**	**2.7 ⑤,10**		**3**	**Index[4]= 11**
4	11.5 ④	3.1 ◎,11	9.5 ①,12	10.4 ②,13	4.3 ⑥,14	4	Index[5]= 15
5	12.4 ⑤	6.5 ②,15	9.5 ⑥,16			2	Index[6]= 17
6	23.1 ⑥	6.4 ①,17	2.5 ②,18	1.4 ⑤,19	13.1 ⑦,20	4	Index[7]= 21
7	51.3 ⑦	9.5 ①,21	1.3 ②,22	9.6 ③,23	3.1 ⑤,24	4	Index[8]= 25

Index[i]~Index[i+1]-1番目がi行目の非対角成分

プログラム：1d.c（4/6）
全体マトリクス：非零非対角成分に対応する列番号

```
/*
// +----------------+
// | CONNECTIVITY |
// +----------------+
*/
  for(i=0;i<N+1;i++)   Index[i] = 2;
  Index[0]= 0;
  Index[1]= 1;
  Index[N]= 1;

  for(i=0;i<N;i++){
          Index[i+1]= Index[i+1] + Index[i];
          }

  NPLU= Index[N];

  for(i=0;i<N;i++){
          jS = Index[i];
          if(i == 0){
                    Item[jS] = i+1;
          }else if(i == N-1){
                    Item[jS] = i-1;
          }else{
                    Item[jS] = i-1;
                    Item[jS+1] = i+1;
          }
  }
```



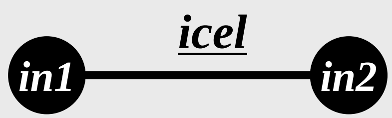
						非対角成分数	
							Index[0]= 0
0	1.1 ◎	2.4 ①,0	3.2 ④,1			2	Index[1]= 2
1	3.6 ①	4.3 ◎,2	2.5 ③,3	3.7 ⑤,4	9.1 ⑦,5	4	Index[2]= 6
2	5.7 ②	1.5 ④,6	3.1 ⑥,7			2	**Index[3]= 8**
3	9.8 ③	**4.1 ①,8**	**2.5 ④,9**	**2.7 ⑤,10**		**3**	**Index[4]= 11**
4	11.5 ④	3.1 ◎,11	9.5 ①,12	10.4 ②,13	4.3 ⑥,14	4	Index[5]= 15
5	12.4 ⑤	6.5 ②,15	9.5 ⑥,16			2	Index[6]= 17
6	23.1 ⑥	6.4 ①,17	2.5 ②,18	1.4 ⑤,19	13.1 ⑦,20	4	Index[7]= 21
7	51.3 ⑦	9.5 ①,21	1.3 ②,22	9.6 ③,23	3.1 ⑤,24	4	Index[8]= 25

Index[i]~Index[i+1]-1番目がi行目の非対角成分

プログラム：1d.c（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

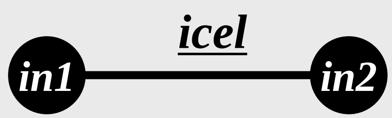
```
/*
// +-----------------+
// | MATRIX assemble |
// +-----------------+
*/
      for(icel=0;icel<NE;icel++){
        in1= Icelnod[2*icel];
        in2= Icelnod[2*icel+1];
        X1 = X[in1];
        X2 = X[in2];
        DL = fabs(X2-X1);

        Ck= Area*COND/DL;
        Emat[0][0]= Ck*Kmat[0][0];
        Emat[0][1]= Ck*Kmat[0][1];
        Emat[1][0]= Ck*Kmat[1][0];
        Emat[1][1]= Ck*Kmat[1][1];

        Diag[in1]= Diag[in1] + Emat[0][0];
        Diag[in2]= Diag[in2] + Emat[1][1];

        if (icel==0){k1=Index[in1];
        }else {k1=Index[in1]+1;}
        k2=Index[in2];

        AMat[k1]= AMat[k1] + Emat[0][1];
        AMat[k2]= AMat[k2] + Emat[1][0];

        QN= 0.5*QV*Area*dX;
        Rhs[in1]= Rhs[in1] + QN;
        Rhs[in2]= Rhs[in2] + QN;
      }
```



プログラム：1d.c（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

```
/*
// +-----------------+
// | MATRIX assemble |
// +-----------------+
*/
      for(icel=0;icel<NE;icel++){
        in1= Icelnod[2*icel];
        in2= Icelnod[2*icel+1];
        X1 = X[in1];
        X2 = X[in2];
        DL = fabs(X2-X1);

        Ck= Area*COND/DL;
        Emat[0][0]= Ck*Kmat[0][0];
        Emat[0][1]= Ck*Kmat[0][1];
        Emat[1][0]= Ck*Kmat[1][0];
        Emat[1][1]= Ck*Kmat[1][1];

        Diag[in1]= Diag[in1] + Emat[0][0];
        Diag[in2]= Diag[in2] + Emat[1][1];

        if (icel==0){k1=Index[in1];
        }else {k1=Index[in1]+1;}
        k2=Index[in2];

        AMat[k1]= AMat[k1] + Emat[0][1];
        AMat[k2]= AMat[k2] + Emat[1][0];

        QN= 0.5*QV*Area*dX;
        Rhs[in1]= Rhs[in1] + QN;
        Rhs[in2]= Rhs[in2] + QN;
      }
```

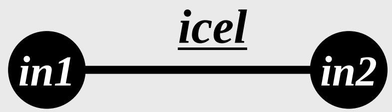


$$[Emat]=[k]^{(e)}=\frac{\lambda A}{L}\begin{bmatrix}+1 & -1\\ -1 & +1\end{bmatrix}=\frac{\lambda A}{L}[Kmat]$$

プログラム：1d.c（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

```
/*
// +-----------------+
// | MATRIX assemble |
// +-----------------+
*/
      for(icel=0;icel<NE;icel++){
        in1= Icelnod[2*icel];
        in2= Icelnod[2*icel+1];
        X1 = X[in1];
        X2 = X[in2];
        DL = fabs(X2-X1);

        Ck= Area*COND/DL;
        Emat[0][0]= Ck*Kmat[0][0];
        Emat[0][1]= Ck*Kmat[0][1];
        Emat[1][0]= Ck*Kmat[1][0];
        Emat[1][1]= Ck*Kmat[1][1];

        Diag[in1]= Diag[in1] + Emat[0][0];
        Diag[in2]= Diag[in2] + Emat[1][1];

        if (icel==0){k1=Index[in1];
        }else {k1=Index[in1]+1;}
        k2=Index[in2];

        AMat[k1]= AMat[k1] + Emat[0][1];
        AMat[k2]= AMat[k2] + Emat[1][0];

        QN= 0.5*QV*Area*dX;
        Rhs[in1]= Rhs[in1] + QN;
        Rhs[in2]= Rhs[in2] + QN;
      }
```



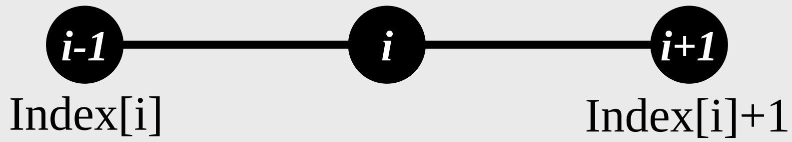
$$[Emat]=[k]^{(e)}=\frac{EA}{L}\begin{bmatrix}+1 & -1\\ -1 & +1\end{bmatrix}$$

プログラム：1d.c（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

```
/*
// +-----------------+
// | MATRIX assemble |
// +-----------------+
*/
      for(icel=0;icel<NE;icel++){
        in1= Icelnod[2*icel];
        in2= Icelnod[2*icel+1];
        X1 = X[in1];
        X2 = X[in2];
        DL = fabs(X2-X1);

        Ck= Area*COND/DL;
        Emat[0][0]= Ck*Kmat[0][0];
        Emat[0][1]= Ck*Kmat[0][1];
        Emat[1][0]= Ck*Kmat[1][0];
        Emat[1][1]= Ck*Kmat[1][1];

        Diag[in1]= Diag[in1] + Emat[0][0];
        Diag[in2]= Diag[in2] + Emat[1][1];

        if (icel==0){k1=Index[in1];
        }else {k1=Index[in1]+1;}
        k2=Index[in2];

        AMat[k1]= AMat[k1] + Emat[0][1];
        AMat[k2]= AMat[k2] + Emat[1][0];

        QN= 0.5*QV*Area*dX;
        Rhs[in1]= Rhs[in1] + QN;
        Rhs[in2]= Rhs[in2] + QN;
      }
```

「i」行の非対角成分：
Index[i], Index[i]+1



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

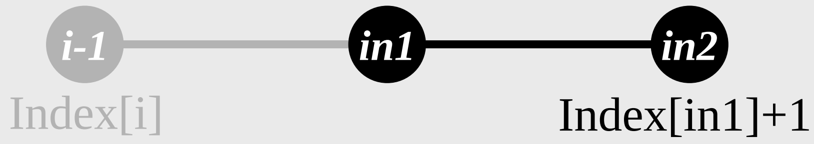
k1

k2

通常の要素：k1
in1の非対角成分としてのin2

```
/*
// +-------------------+
// | MATRIX assemble |
// +-------------------+
*/
      for(icel=0;icel<NE;icel++){
        in1= Icelnod[2*icel];
        in2= Icelnod[2*icel+1];
        X1 = X[in1];
        X2 = X[in2];
        DL = fabs(X2-X1);

        Ck= Area*COND/DL;
        Emat[0][0]= Ck*Kmat[0][0];
        Emat[0][1]= Ck*Kmat[0][1];
        Emat[1][0]= Ck*Kmat[1][0];
        Emat[1][1]= Ck*Kmat[1][1];

        Diag[in1]= Diag[in1] + Emat[0][0];
        Diag[in2]= Diag[in2] + Emat[1][1];

        if (icel==0){k1=Index[in1];
        }else {k1=Index[in1]+1;}
        k2=Index[in2];

        AMat[k1]= AMat[k1] + Emat[0][1];
        AMat[k2]= AMat[k2] + Emat[1][0];

        QN= 0.5*QV*Area*dX;
        Rhs[in1]= Rhs[in1] + QN;
        Rhs[in2]= Rhs[in2] + QN;
      }
```

「i」行の非対角成分：
Index[i], Index[i]+1



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

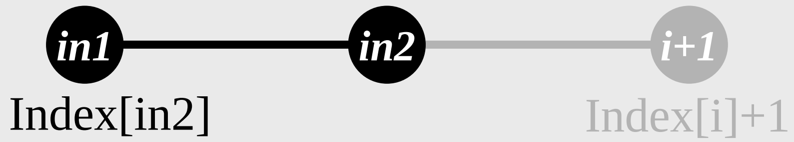
k1

通常の要素：k2

in2の非対角成分としてのin1

```
/*
// +------------------+
// | MATRIX assemble |
// +------------------+
*/
      for(icel=0;icel<NE;icel++){
        in1= Icelnod[2*icel];
        in2= Icelnod[2*icel+1];
        X1 = X[in1];
        X2 = X[in2];
        DL = fabs(X2-X1);

        Ck= Area*COND/DL;
        Emat[0][0]= Ck*Kmat[0][0];
        Emat[0][1]= Ck*Kmat[0][1];
        Emat[1][0]= Ck*Kmat[1][0];
        Emat[1][1]= Ck*Kmat[1][1];

        Diag[in1]= Diag[in1] + Emat[0][0];
        Diag[in2]= Diag[in2] + Emat[1][1];

        if (icel==0){k1=Index[in1];
        }else {k1=Index[in1]+1;}
        k2=Index[in2];

        AMat[k1]= AMat[k1] + Emat[0][1];
        AMat[k2]= AMat[k2] + Emat[1][0];

        QN= 0.5*QV*Area*dX;
        Rhs[in1]= Rhs[in1] + QN;
        Rhs[in2]= Rhs[in2] + QN;
      }
```

「i」行の非対角成分：
Index[i], Index[i]+1

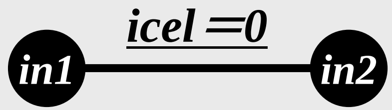


$$[Emat]=[k]^{(e)}=\frac{\lambda A}{L}\begin{bmatrix}+1 & -1\\ -1 & +1\end{bmatrix}$$

k2

0番要素（左端）：k1
in1の非対角成分としてのin2

```
/*
// +-------------------+
// | MATRIX assemble |
// +-------------------+
*/
      for(icel=0;icel<NE;icel++){
        in1= Icelnod[2*icel];
        in2= Icelnod[2*icel+1];
        X1 = X[in1];
        X2 = X[in2];
        DL = fabs(X2-X1);

        Ck= Area*COND/DL;
        Emat[0][0]= Ck*Kmat[0][0];
        Emat[0][1]= Ck*Kmat[0][1];
        Emat[1][0]= Ck*Kmat[1][0];
        Emat[1][1]= Ck*Kmat[1][1];

        Diag[in1]= Diag[in1] + Emat[0][0];
        Diag[in2]= Diag[in2] + Emat[1][1];

        if (icel==0){k1=Index[in1];
        }else {k1=Index[in1]+1;}
        k2=Index[in2];

        AMat[k1]= AMat[k1] + Emat[0][1];
        AMat[k2]= AMat[k2] + Emat[1][0];

        QN= 0.5*QV*Area*dX;
        Rhs[in1]= Rhs[in1] + QN;
        Rhs[in2]= Rhs[in2] + QN;
      }
```



「i」行の非対角成分：Index[i]のみ

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

k1

プログラム：1d.c（5/6）
体積発熱項，右辺

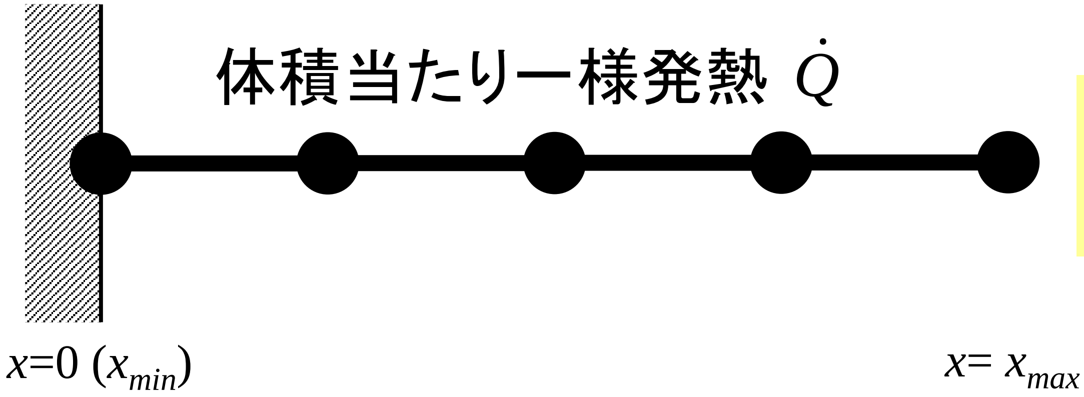
```
/*
// +-----------------+
// | MATRIX assemble |
// +-----------------+
*/
      for(icel=0;icel<NE;icel++){
        in1= Icelnod[2*icel];
        in2= Icelnod[2*icel+1];
        X1 = X[in1];
        X2 = X[in2];
        DL = fabs(X2-X1);

        Ck= Area*COND/DL;
        Emat[0][0]= Ck*Kmat[0][0];
        Emat[0][1]= Ck*Kmat[0][1];
        Emat[1][0]= Ck*Kmat[1][0];
        Emat[1][1]= Ck*Kmat[1][1];

        Diag[in1]= Diag[in1] + Emat[0][0];
        Diag[in2]= Diag[in2] + Emat[1][1];

        if (icel==0){k1=Index[in1];
        }else {k1=Index[in1]+1;}
        k2=Index[in2];

        AMat[k1]= AMat[k1] + Emat[0][1];
        AMat[k2]= AMat[k2] + Emat[1][0];

        QN= 0.5*QV*Area*dX;
        Rhs[in1]= Rhs[in1] + QN;
        Rhs[in2]= Rhs[in2] + QN;
      }
```

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

プログラム：1d.c（6/6）
第一種境界条件@x=0

```
/*
// +--------------------+
// | BOUNDARY conditions |
// +--------------------+
*/

/* X=Xmin */
        i=0;
        jS= Index[i];
        AMat[jS]= 0.0;
        Diag[i ]= 1.0;
        Rhs [i ]= 0.0;

        for(k=0;k<NPLU;k++){
          if(Item[k]==0){AMat[k]=0.0;
          }}
```

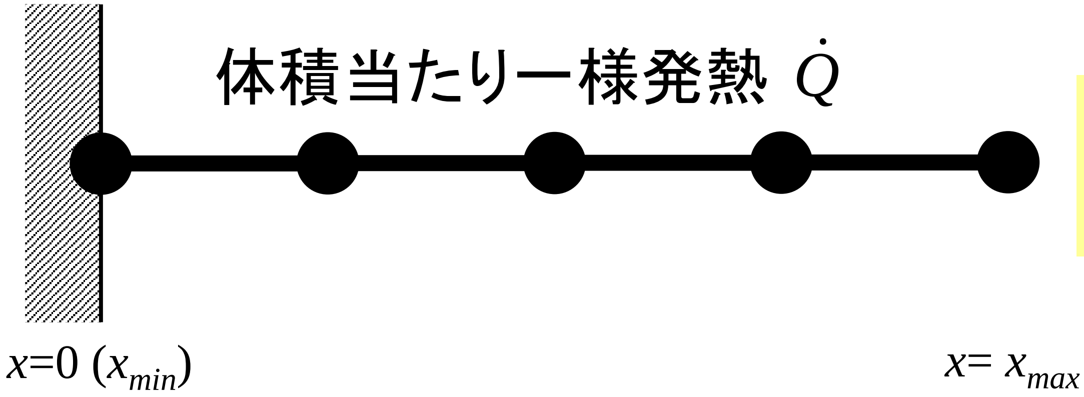
対象とする問題：一次元熱伝導問題



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

- 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）
  - $x=x_{max}$ ：$\dfrac{\partial T}{\partial x} = 0$（断熱）

x=0で成立する方程式 T_0=0



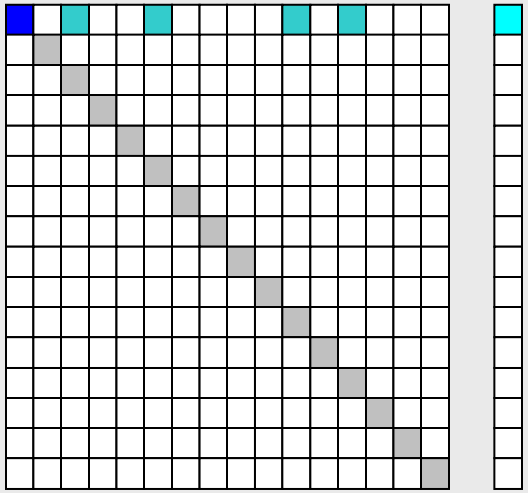
$$\frac{\partial}{\partial x}\left(\lambda\frac{\partial T}{\partial x}\right)+\dot{Q}=0$$

- 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}：$\dfrac{\partial T}{\partial x}=0$（断熱）

プログラム：1d.c（6/6）
第一種境界条件@x=0

```
/*
// +----------------------+
// | BOUNDARY conditions |
// +----------------------+
*/

/* X=Xmin */
        i=0;
        jS= Index[i];
        AMat[jS]= 0.0;
        Diag[i ]= 1.0;
        Rhs [i ]= 0.0;

        for(k=0;k<NPLU;k++){
          if(Item[k]==0){AMat[k]=0.0;
          }}
```

$T_0=0$
対角成分=1，右辺=0，非対角成分=0

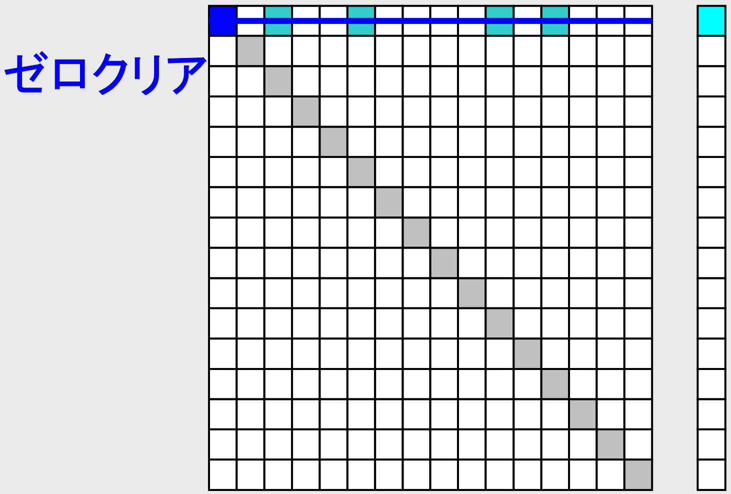


プログラム：1d.c（6/6）
第一種境界条件@x=0

```
/*
// +----------------------+
// | BOUNDARY conditions |
// +----------------------+
*/

/* X=Xmin */
        i=0;
        jS= Index[i];
        AMat[jS]= 0.0;
        Diag[i ]= 1.0;
        Rhs [i ]= 0.0;

        for(k=0;k<NPLU;k++){
          if(Item[k]==0){AMat[k]=0.0;
          }}
```

$T_0=0$

対角成分=1，右辺=0，非対角成分=0

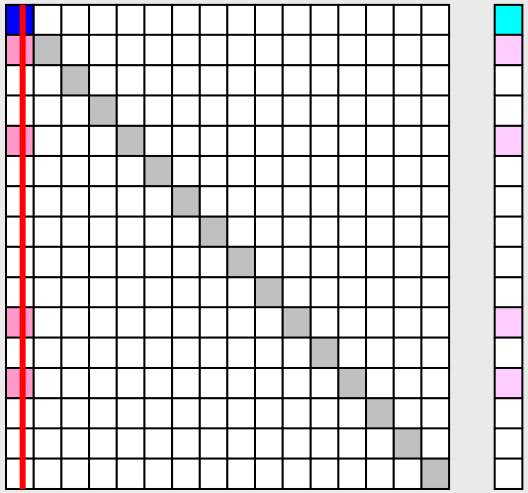


プログラム：1d.c（6/6）
第一種境界条件@x=0

```
/*
// +--------------------+
// | BOUNDARY conditions |
// +--------------------+
*/

/* X=Xmin */
        i=0;
        jS= Index[i];
        AMat[jS]= 0.0;
        Diag[i ]= 1.0;
        Rhs [i ]= 0.0;

        for(k=0;k<NPLU;k++){
          if(Item[k]==0){AMat[k]=0.0;
          }}
```

T_0=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≠0の場合

```
/*
// +----------------------+
// | BOUNDARY conditions |
// +----------------------+
*/
```

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

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

```
/* X=Xmin */
        i=0;
        jS= Index[i];
        AMat[jS]= 0.0;
        Diag[i ]= 1.0;
        Rhs [i ]= PHImin;

          for(j=1;i<N;i++){
            for (k=Index[j];k<Index[j+1];k++){
              if(Item[k]==0){
                Rhs [j]= Rhs[j] - Amat[k]*PHImin;
                AMat[k]= 0.0;
            }}
```

第一種境界条件がT≠0の場合

```
/*
// +----------------------+
// | BOUNDARY conditions |
// +----------------------+
*/

/* X=Xmin */
        i=0;
        jS= Index[i];
        AMat[jS]= 0.0;
        Diag[i ]= 1.0;
        Rhs [i ]= PHImin;

          for(j=1;i<N;i++){
            for (k=Index[j];k<Index[j+1];k++){
              if(Item[k]==0){
                Rhs [j]= Rhs[j] - Amat[k]*PHImin;
                AMat[k]= 0.0;
            }}
```

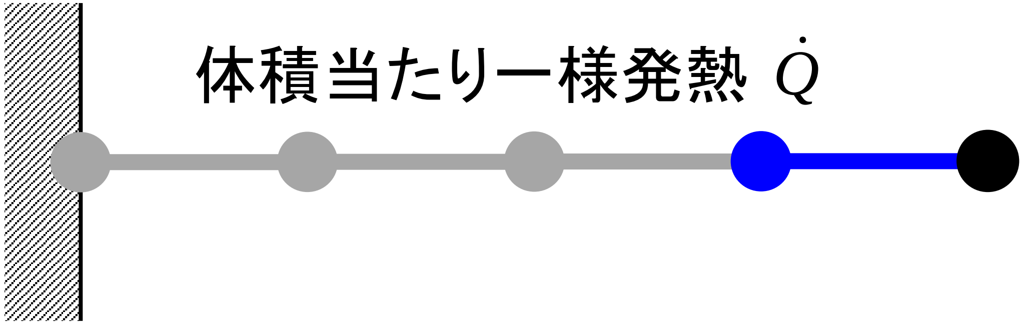
行列の対称性を保つため，第一種境界条件を適用している節点に対応する「列」を，右辺に移項して消去する

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

$$
= Rhs_j - Amat_{k_s} \phi_{Item[k_s]}
$$

$$
= Rhs_j - Amat_{k_s} \phi_{\min} \quad where\ Item[k_s] = 0
$$

第二種境界条件（断熱）



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

x=0 (x_{min})

x= x_{max}

$$T=0 @ x=0$$

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

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

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

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]z^(i-1)= 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)

```
/*
// +----------------+
// | CG iterations |
// +----------------+
*/
        R = 0;
        Z = 1;
        Q = 1;
        P = 2;
        DD= 3;

        for(i=0;i<N;i++){
                W[DD][i]= 1.0 / Diag[i];
        }
```

```
W[0][i]= W[R][i]  ⇒  {r}
W[1][i]= W[Z][i]  ⇒  {z}
W[1][i]= W[Q][i]  ⇒  {q}
W[2][i]= W[P][i]  ⇒  {p}
W[3][i]= W[DD][i] ⇒  1/{D}
```

Compute $r^{(0)}= b-[A]x^{(0)}$
for i= 1, 2, …
  solve $[M]z^{(i-1)}= r^{(i-1)}$
  $\rho_{i-1}= r^{(i-1)}\ z^{(i-1)}$
  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)

```
/*
// +----------------+
// | CG iterations |
// +----------------+
*/
          R = 0;
          Z = 1;
          Q = 1;
          P = 2;
          DD= 3;

          for(i=0;i<N;i++){
                    W[DD][i]= 1.0 / Diag[i];
          }
```

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[0][i]= W[R][i]  ⇒  {r}
W[1][i]= W[Z][i]  ⇒  {z}
W[1][i]= W[Q][i]  ⇒  {q}
W[2][i]= W[P][i]  ⇒  {p}
W[3][i]= W[DD][i] ⇒ 1/{D}
```

CGソルバー（2/6）

```
/*
//-- {r0}= {b} - [A]{xini} |
*/
        for(i=0;i<N;i++){
                W[R][i] = Diag[i]*U[i];
                for(j=Index[i];j<Index[i+1];j++){
                        W[R][i] += AMat[j]*U[Item[j]];
                }
        }

        BNorm2 = 0.0;
        for(i=0;i<N;i++){
                BNorm2 += Rhs[i] * Rhs[i];
                W[R][i] = Rhs[i] - W[R][i];
        }
```

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

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

BNRM2=|b|²
あとで収束判定に使用

CGソルバー(3/6)

```
 for(iter=1;iter<=IterMax;iter++){

/*
//-- {z}= [Minv]{r}
*/
    for(i=0;i<N;i++){
        W[Z][i] = W[DD][i] * W[R][i];
    }

/*
//-- RHO= {r}{z}
*/
    Rho= 0.0;
    for(i=0;i<N;i++){
        Rho += W[R][i] * W[Z][i];
    }
```

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

CGソルバー(4/6)

```
/*
//-- {p} = {z} if      ITER=1
//   BETA= RHO / RHO1  otherwise
*/
  if(iter == 1){
     for(i=0;i<N;i++){
         W[P][i] = W[Z][i];
     }
  }else{
         Beta = Rho / Rho1;
         for(i=0;i<N;i++){
             W[P][i] = W[Z][i] + Beta*W[P][i];
         }
  }

/*
//-- {q}= [A]{p}
*/
  for(i=0;i<N;i++){
      W[Q][i] = Diag[i] * W[P][i];
      for(j=Index[i];j<Index[i+1];j++){
          W[Q][i] += AMat[j]*W[P][Item[j]];
          }
      }
```

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

CGソルバー（5/6）

```
/*
//-- ALPHA= RHO / {p}{q}
*/
  C1 = 0.0;
  for(i=0;i<N;i++){
      C1 += W[P][i] * W[Q][i];
  }

  Alpha = Rho / C1;

/*
//-- {x}= {x} + ALPHA*{p}
//    {r}= {r} - ALPHA*{q}
*/
  for(i=0;i<N;i++){
      U[i]    += Alpha * W[P][i];
      W[R][i] -= Alpha * W[Q][i];
  }
```

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

CGソルバー（6/6）

```
  DNorm2 = 0.0;
  for(i=0;i<N;i++){
      DNorm2 += W[R][i] * W[R][i];
  }
  Resid = sqrt(DNorm2/BNorm2);

  if((iter)%1000 == 0){
      printf("%8d%s%16.6e¥n", iter, "
              iters, RESID=", Resid);
   }
   if(Resid <= Eps){ierr = 0; break;}
   Rho1 = Rho;   ρi-2
}
```

```
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) + αip(i)
      r(i)= r(i-1) - αiq(i)
      check convergence |r|
end
```

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

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

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**

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

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

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）

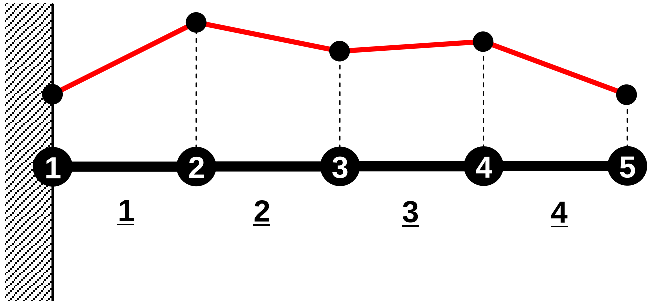
より精度をあげるには？

- 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
```



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

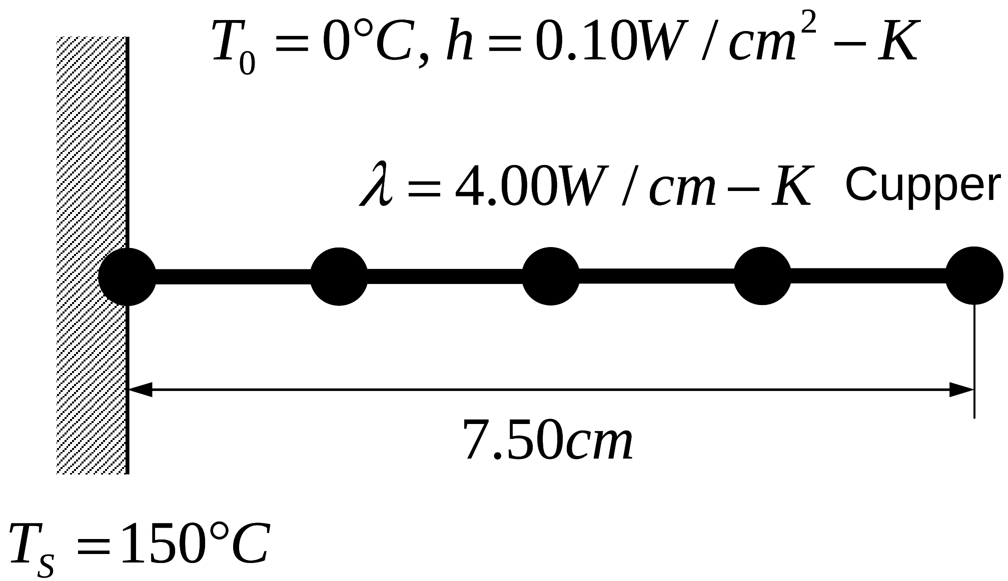
より精度をあげるには？

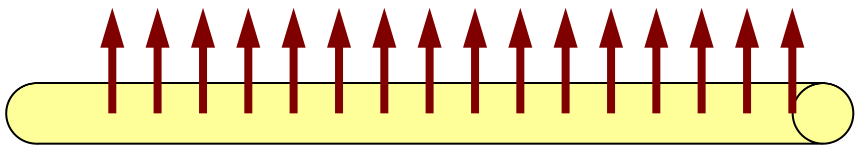
- メッシュを細かくする
- 高次の補間関数（形状関数）を使用する
  - 高次要素
  - 線形要素，一次要素は低次要素と呼ばれる
- n次微分係数の連続性を保証する定式化を適用する
  - C^n連続性

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

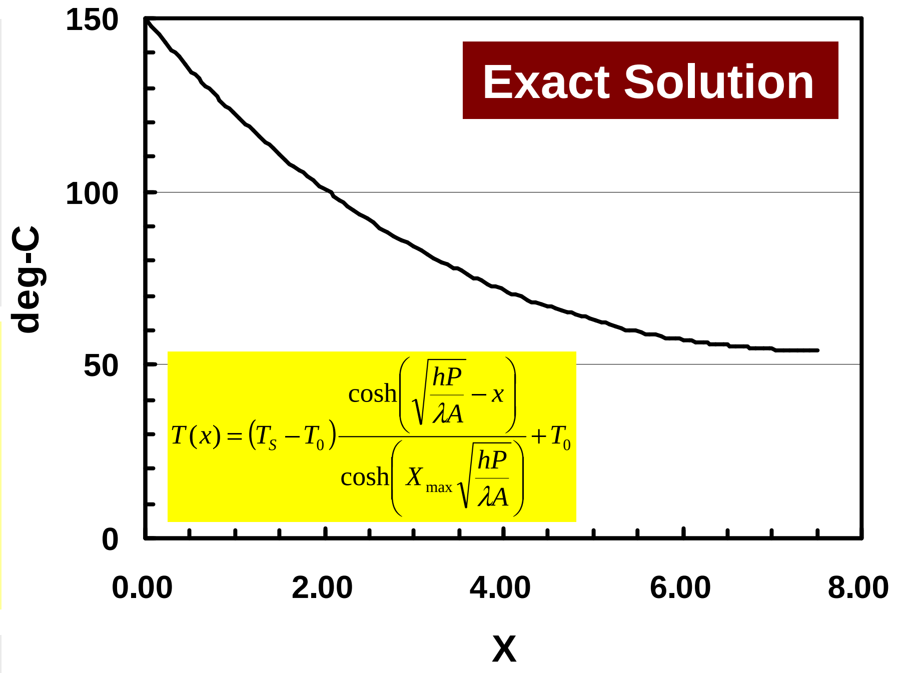
- Temp. Thermal Fins
- Circular Sectional Area, r=1cm
- Boundary Condition
  - x=0 : Fixed Temperature
  - x=7.5 : Insulated
- Convective Heat Transfer on Cylindrical Surface
  - $q = h(T - T_0)$
  - q : Heat Flux
    - Heat Flow/Unit Surface Area/sec.

Example: 1D Heat Transfer (2/2)

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

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

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



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