MPIによる並列アプリケーション開発法入門(I)

2011年5月19日・20日

中島研吾
東京大学情報基盤センター

T2Kオープンスパコン(東大)並列プログラミング講習会

本講習の目的

- 1CPU用シリアルアプリケーションの並列化（Flat MPI）
  - 並列分散データ構造の重要性
- 並列アプリケーションを使用したシミュレーションの手順を一通り体験する
  - データ生成（初期データ，領域分割）
  - 計算
  - ポスト処理

- 対象
  - 有限体積法（または直接差分法）による熱伝導解析コード
  - 共役勾配法（CG法）による連立一次方程式求解

中島研吾の紹介

- 所属
  - 東京大学情報基盤センター
  - スーパーコンピューティング研究部門
    - 大学院情報理工学系研究科数理情報学専攻（兼担）
- 専門分野
  - 計算力学，（並列）数値線形代数
  - 並列計算プログラミングモデル，（並列）適応格子
- これまで関わったプロジェクト
  - GeoFEM：地球シミュレータ関連，並列有限要素法
  - HPC-MW：戦略的基盤ソフトウェア
  - ppOpen-HPC：自動チューニング機構を有するアプリケーション開発・実行環境（FY.2011～）
- お気軽に質問ください
  - nakajima(at)cc.u-tokyo.ac.jp

スケジュール（予定）

- 5月19日（木）: 1000~1200
  - T2Kオープンスパコン（東大）へのログイン
- 5月19日（木）: 1300~1730
  - 並列アプリケーション開発入門（I）
    - 並列プログラミングの学び方
    - 有限体積法
    - 1CPU用計算プログラム **eps_fvm**
  - 並列アプリケーション開発入門（II）
    - MPI超入門
    - 並列分散メッシュデータ
- 5月20日（金）: 0930~1200
  - 並列アプリケーション開発入門（II）（続き）
    - 並列分散メッシュデータ（続き）
    - 領域分割
- 5月20日（金）: 1300～1700
  - 並列アプリケーション開発入門（III）
    - 並列FVMコードの開発
  - 実習

謝 辞

- サイバネットシステム株式会社

準備（Windows）

- T2Kへのログイン
- WinSCP等インストール
- MicroAVSインストール

注意等

- 講義室内では飲食厳禁です。今後のこともありますのでご理解，ご協力のほどをお願いいたします。
  - 自動販売機は工学部12号館前，武田先端知ビル内。
- アンケートにご協力ください。

- 背景：並列プログラミングの学び方
- 有限体積法の概要
- 1CPU用プログラム **eps_fvm**
  - メッシュ生成，形状データ
  - 計算実行例
  - プログラムの内容

背　景

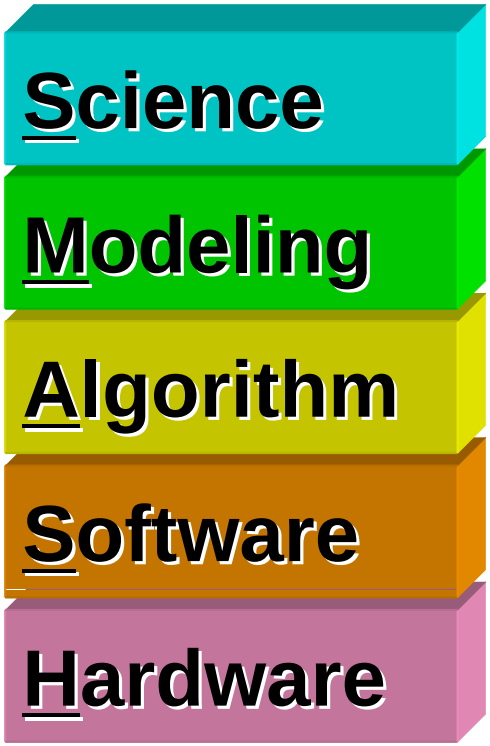
- 「T2Kオープンスパコン」,「次世代スーパーコンピュータ」等の開発を背景に，大規模並列シミュレーションへの期待は，産学において一層高まっている。

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

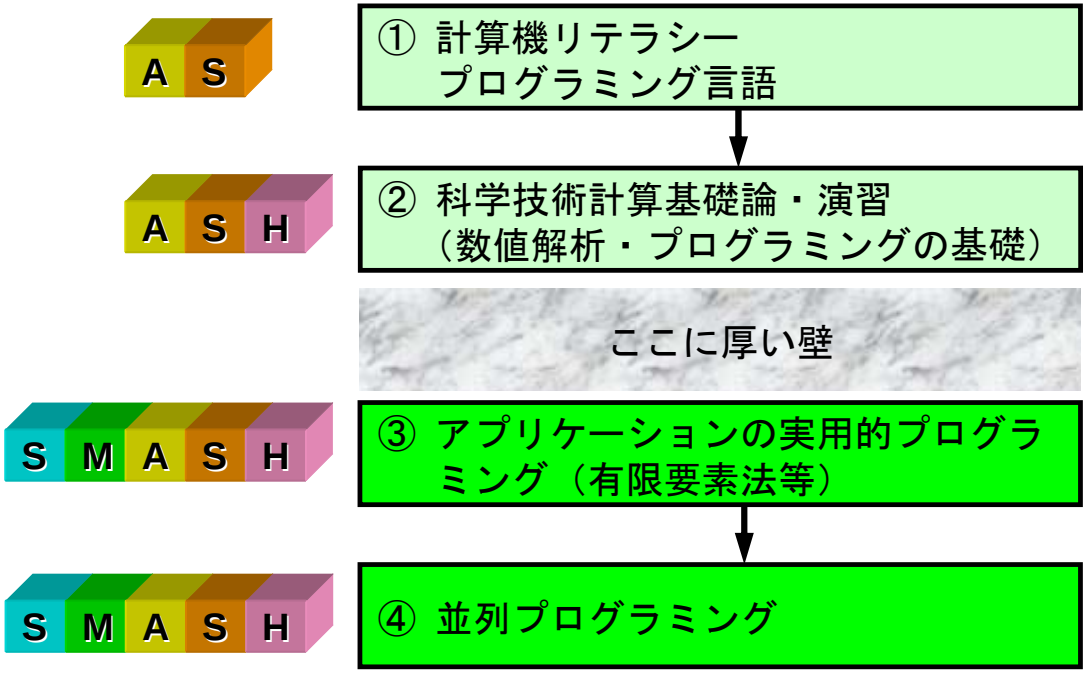
4S型人材育成戦略

「4つのS」: System, Stage, Status, Style（1/2）

- **System**
  - SMASH
  - 科学技術計算の真髄



- **Stage: 4つの段階**
  - 並列プログラミングへの道
  - ③が最も重要，かつ教育困難
    - 現状はアルゴリズム中心（連続体力学）



並列プログラミングへの道

- ③が重要であるが，プログラミング教育はほとんど実施されていない

③（実用プログラミング）を学ぶには?

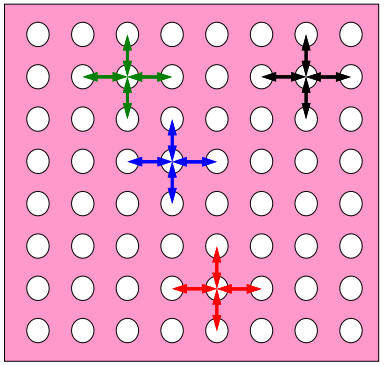
- プログラミング能力をつけるためには，徹底して実アプリケーションコードのソースを「読む」能力をつけることが重要（特に学部4年～大学院初級）
  - 英語，漢文の音読のごとく

- 並列計算で大事なのはMPI等の文法ではなく，並列データ構造等の設計。対象アプリケーション，アルゴリズムに対する深い理解が必要⇒③が重要

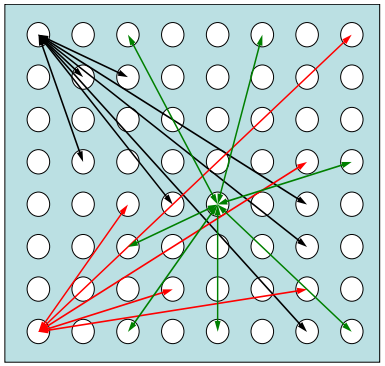
- これまでの経験で効果は確認済

科学技術アプリケーション

- 局所的手法
  - 差分法，有限要素法，有限体積法
  - 疎行列



- 大域的手法
  - 境界要素法，スペクトル法等
  - 密行列



本講習の方針

- まずは1CPU用のシリアルアプリケーションコードを徹底理解
  - アルゴリズムのやさしい有限体積法を選択
  - 熱伝導方程式
- アプリケーションに適した並列計算のためのデータ構造（＝局所分散データ構造）を考える
- 慣れているFORTRANで解説していますが，C言語版のアプリケーションも準備，ほとんど各行解説するので，余り支障は無いでしょう
- MPIそのものについてはあまり詳しく説明しません。MPI入門向け講習会は年2～3回程度実施されています。

- 背景：並列プログラミングの学び方
- **有限体積法の概要**
- 1CPU用プログラム **eps_fvm**
  - メッシュ生成，形状データ
  - 計算実行例
  - プログラムの内容

対象とするアプリケーションの概要

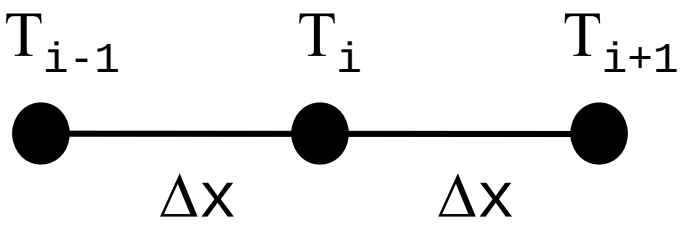
- 支配方程式：三次元定常熱伝導方程式
  - 物性の温度依存性無し，等方性

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

- 有限体積法（Finite Volume Method，**FVM**）による空間離散化
  - 任意形状の要素，要素中心で変数を定義。
  - 直接差分法（Direct Finite Difference Method）とも呼ばれる。
- 境界条件
  - ディリクレ（温度固定），ノイマン（境界熱流束），体積発熱
- 反復法による連立一次方程式解法
  - 共役勾配法（CG）＋対角スケーリング（点ヤコビ）前処理

一次元熱伝導方程式:中央差分
熱伝導率λ一定

$$\frac{d}{dx}\left(\lambda\frac{dT}{dx}\right)_i + Q = 0$$



$$\frac{d}{dx}\left(\lambda\frac{dT}{dx}\right)_i = \frac{\left(\lambda\frac{dT}{dx}\right)_{i+1/2} - \left(\lambda\frac{dT}{dx}\right)_{i-1/2}}{\Delta x} = \frac{\lambda\frac{T_{i+1}-T_i}{\Delta x} - \lambda\frac{T_i - T_{i-1}}{\Delta x}}{\Delta x}$$

$$= \lambda\left(\frac{T_{i+1} - 2T_i + T_{i-1}}{\Delta x^2}\right)$$

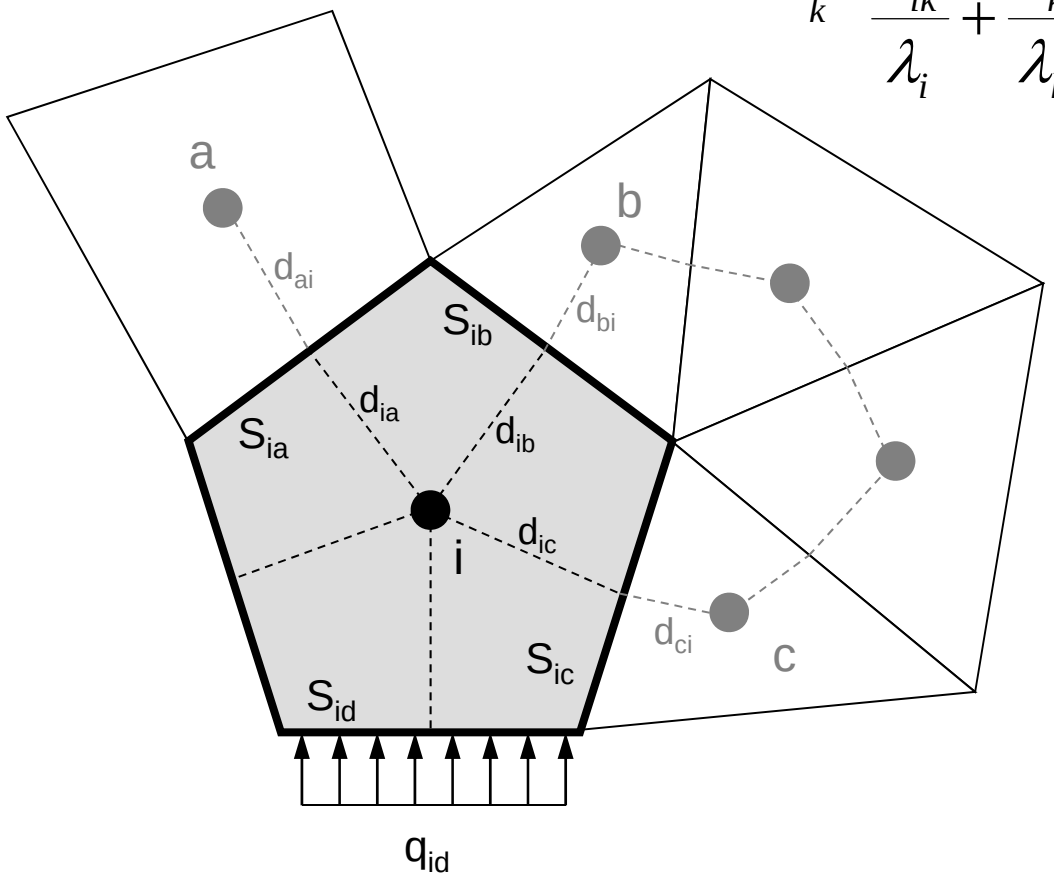
有限体積法による空間離散化

熱流束に関するつりあい式

隣接要素との熱伝導

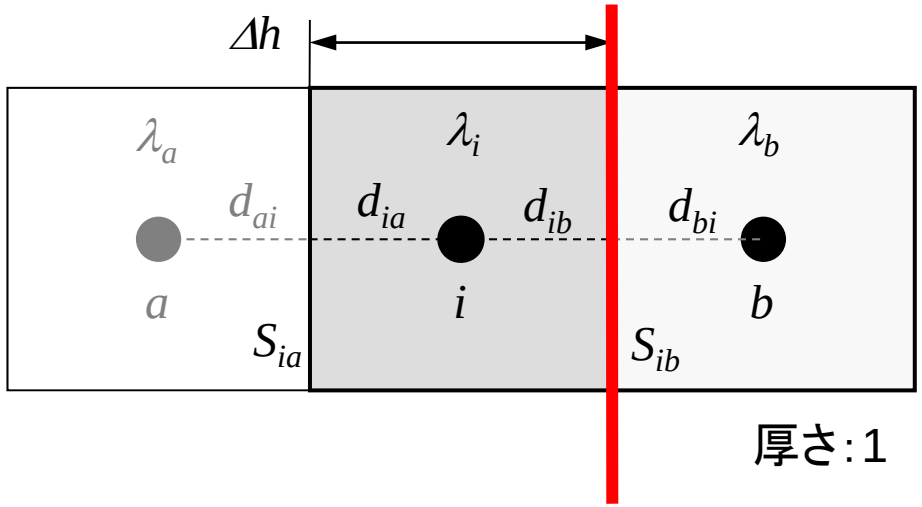
$$\sum_k \frac{S_{ik}}{\frac{d_{ik}}{\lambda_i}+\frac{d_{ki}}{\lambda_k}}\left(T_k - T_i\right) + \sum_d S_{id}\dot{q}_{id} + V_i\dot{Q}_i = 0$$

要素境界面　体積発熱
通過熱流束



λ　:熱伝導率
V_i　:要素体積
S　:表面面積
d_{ij}　:要素中心から表面までの距離
q　:表面フラックス
Q　:体積発熱

一次元差分法との比較(1/3)



一辺の長さΔhの正方形メッシュ

接触面積: $S_{ik} = \Delta h$

要素体積: $V_i = \Delta h^2$

接触面までの距離: $d_{ij} = \Delta h/2$

各メッシュの熱伝導率: λi

この面を通過する熱量: Qs_{ib}

$$Qs_{ib} = -\lambda \frac{T_b - T_i}{d_{ib} + d_{bi}} \cdot S_{ib} = -\frac{T_b - T_i}{\frac{d_{ib}}{\lambda} + \frac{d_{bi}}{\lambda}} \cdot S_{ib}$$

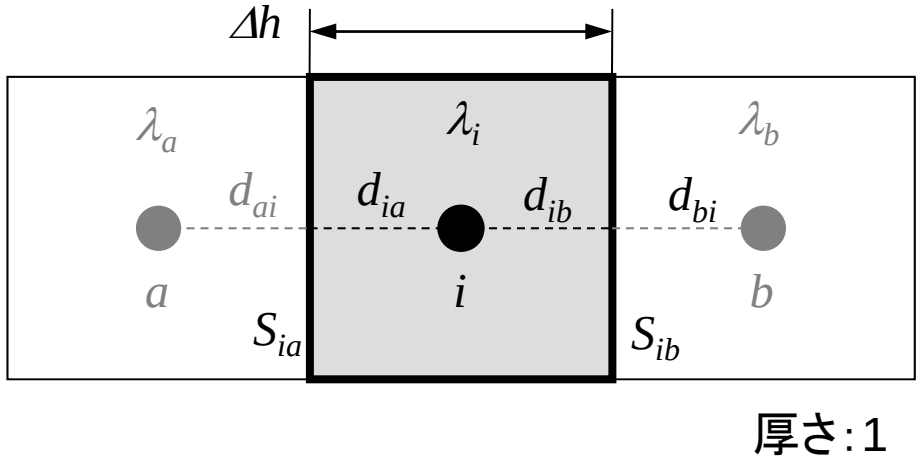
熱伝導率が一様の場合
フーリエの法則

面を通過する熱量
＝ー(熱伝導率)×(温度勾配)

$$Qs_{ib} = -\frac{T_b - T_i}{\frac{d_{ib}}{\lambda_i} + \frac{d_{bi}}{\lambda_b}} \cdot S_{ib}$$

熱伝導率が要素ごとに
異なる場合: 調和平均

一次元差分法との比較(2/3)



一辺の長さΔhの正方形メッシュ

接触面積: $S_{ik} = \Delta h$

要素体積: $V_i = \Delta h^2$

接触面までの距離: $d_{ij} = \Delta h/2$

各メッシュの熱伝導率: λi

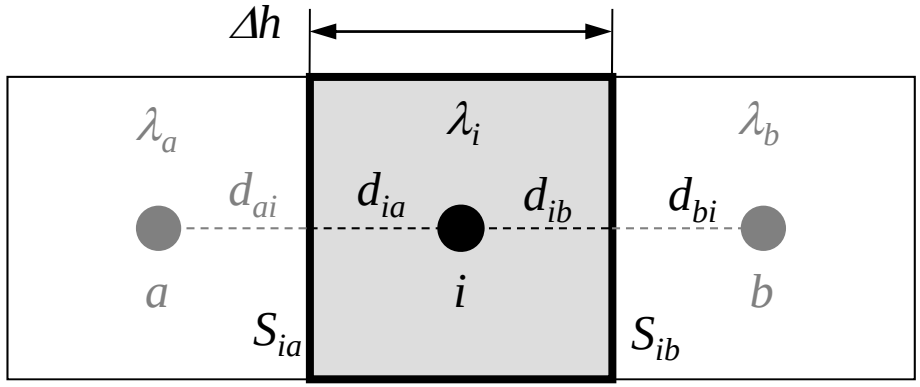
$$\sum_k \frac{S_{ik}}{\frac{d_{ik}}{\lambda_i} + \frac{d_{ki}}{\lambda_k}} (T_k - T_i) + \sum_d S_{id} \dot{q}_{id} + V_i \dot{Q}_i = 0$$

両辺をV_iで割る:

$$\boxed{\frac{1}{V_i} \sum_k \frac{S_{ik}}{\frac{d_{ik}}{\lambda_i} + \frac{d_{ki}}{\lambda_k}} (T_k - T_i)} + \frac{1}{V_i} \sum_d S_{id} \dot{q}_{id} + \dot{Q}_i = 0$$

この部分に注目すると

一次元差分法との比較(3/3)



厚さ:1

一辺の長さΔhの正方形メッシュ

接触面積: $S_{ik} = \Delta h$

要素体積: $V_i = \Delta h^2$

接触面までの距離: $d_{ij} = \Delta h/2$

各メッシュの熱伝導率: λi

熱伝導率一様として

$$\frac{1}{V_i}\sum_k \frac{S_{ik}}{\frac{d_{ik}}{\lambda_i}+\frac{d_{ki}}{\lambda_k}}(T_k - T_i) = \frac{1}{(\Delta h)^2}\sum_{k=a,b}\frac{\Delta h}{\frac{\Delta h/2}{\lambda}+\frac{\Delta h/2}{\lambda}}(T_k - T_i)$$

$$= \frac{1}{(\Delta h)^2}\sum_{k=a,b}\frac{\Delta h}{\frac{\Delta h}{2\lambda}+\frac{\Delta h}{2\lambda}}(T_k - T_i) = \frac{1}{(\Delta h)^2}\sum_{k=a,b}\frac{\Delta h}{\frac{\Delta h}{\lambda}}(T_k - T_i) = \frac{1}{(\Delta h)^2}\sum_{k=a,b}\lambda(T_k - T_i)$$

$$= \lambda\cdot\left[\frac{1}{(\Delta h)^2}(T_a - T_i) + \frac{1}{(\Delta h)^2}(T_b - T_i)\right] = \boxed{\lambda\cdot\left[\frac{T_a - 2T_i + T_b}{(\Delta h)^2}\right]}$$

有限体積法

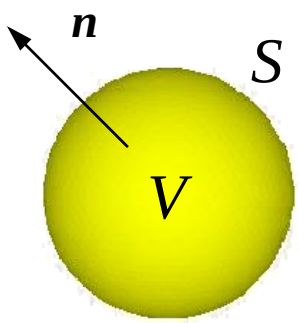
- セル中心型有限体積法
  - 「直接差分法」
  - ガウスグリーン型有限体積法

- 任意形状の要素を扱うことが可能
  - 均等メッシュでない場合は空間について一次精度

- 各要素の体積，要素間の接続関係（接触面積，重心（本当は「外心」）から接触面への距離）などを予め指定する必要があるため，メッシュ作成は多少面倒
- 境界面，ディリクレ境界条件（温度固定）の扱いが問題

ガウスの定理：Gauss's Theorem

$$\int_V \left(\frac{\partial U}{\partial x} + \frac{\partial V}{\partial y} + \frac{\partial W}{\partial z} \right) dV = \int_S \left(U n_x + V n_y + W n_z \right) dS$$



- 三次元デカルト座標（x,y,z）
- 滑らかな閉曲面Sによって囲まれたV
- V内で定義される，3つの連続関数
  - $U(x,y,z)$，$V(x,y,z)$，$W(x,y,z)$
- 曲面S上で外向きに引いた法線ベクトル$\boldsymbol{n}$
  - n_x，n_y，n_z：方向余弦

ベクトル表記すると

- ガウスの定理

$$\int_V \nabla \cdot \mathbf{w}\, dV = \int_S \mathbf{w}^T \mathbf{n}\, dS$$

- グリーンの定理

$$\int_V v \Delta u\, dV = \int_S \left(v \nabla u\right)^T \mathbf{n}\, dS - \int_V \left(\nabla^T v\right)\left(\nabla u\right) dV$$

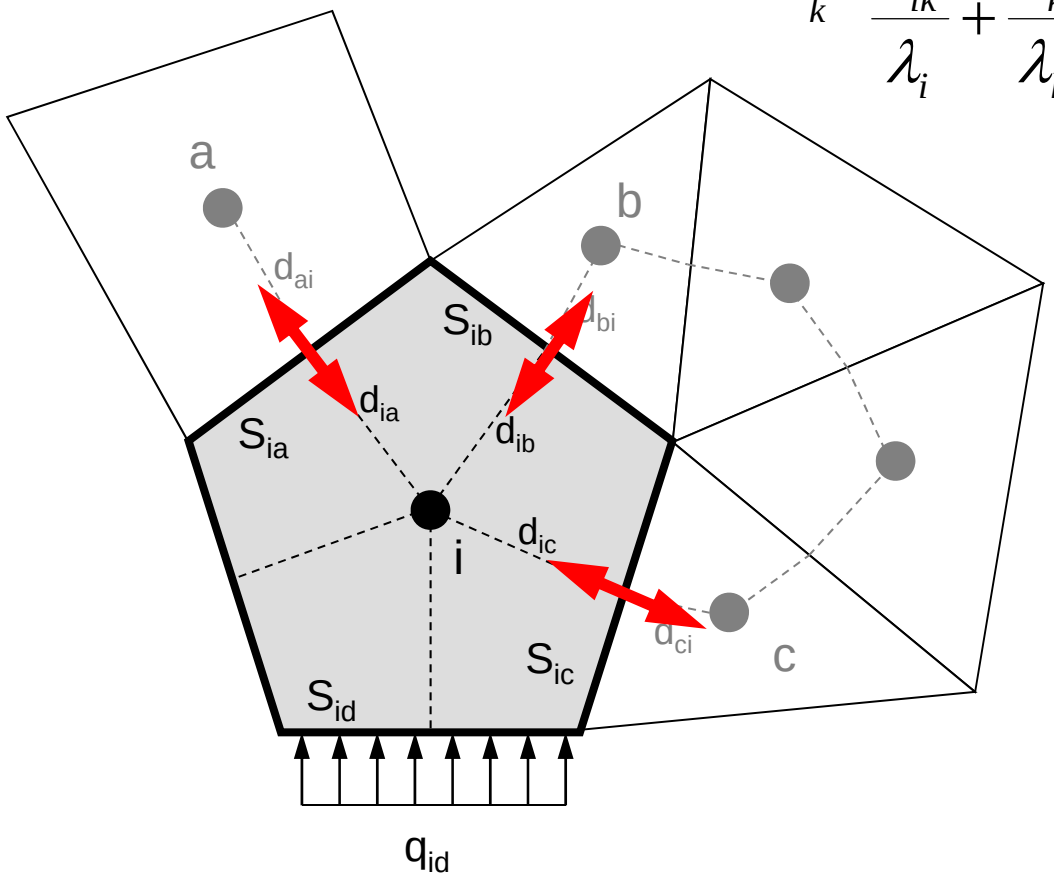
有限体積法による空間離散化

各要素の境界面を通過する熱量に着目

隣接要素との熱伝導

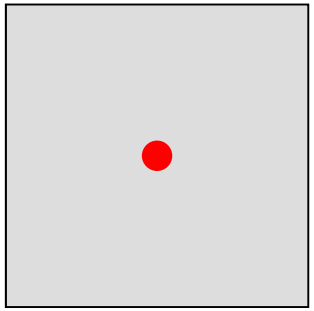
$$\sum_k \frac{S_{ik}}{\frac{d_{ik}}{\lambda_i}+\frac{d_{ki}}{\lambda_k}}\left(T_k - T_i\right) + \sum_d S_{id}\dot{q}_{id} + V_i\dot{Q}_i = 0$$

要素境界面通過熱流束　体積発熱

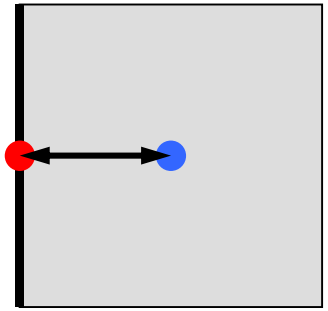


λ　:熱伝導率
V_i　:要素体積
S　:表面面積
d_{ij}　:要素中心から表面までの距離
q　:表面フラックス
Q　:体積発熱

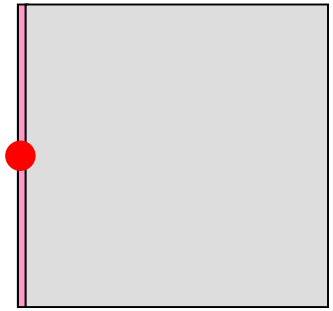
ディリクレ境界条件（境界温度固定）



単純に要素中心で指定
（精度悪化）

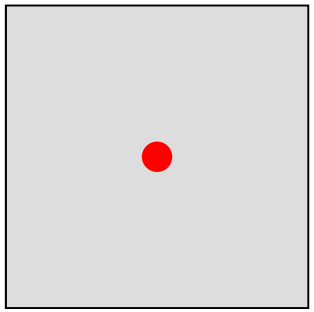


境界面からの等価な
フラックスを加算
（面積，重心との距離必要）

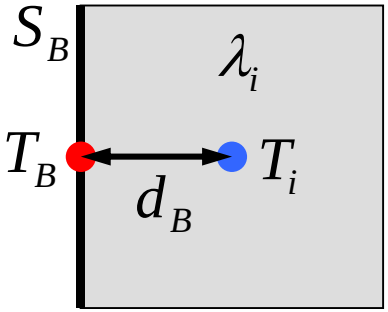


「薄い」要素を設定
（～10^{-20}）

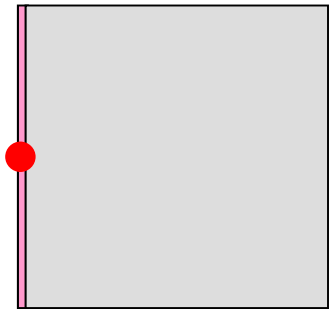
ディリクレ境界条件（境界温度固定）



単純に要素中心で指定
（精度悪化）



境界面からの等価な
フラックスを加算
（面積，重心との距離必要）



「薄い」要素を設定
（～10^{-20}）

現在はこの方式を使用

$$q = \frac{S_B}{d_B / \lambda_i}\left(T_B - T_i\right)$$

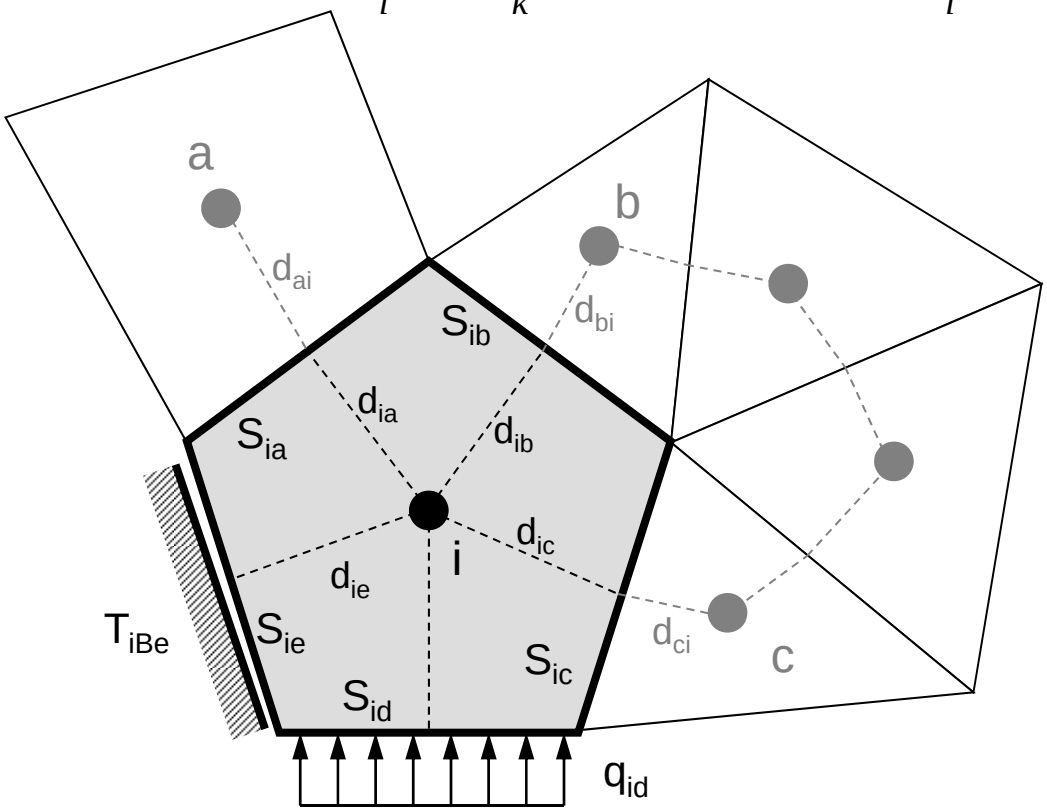
有限体積法による空間離散化

熱流束に関するつりあい式：ディリクレ境界条件考慮

隣接要素との熱伝導　　温度固定境界

$$\sum_k \frac{S_{ik}}{\frac{d_{ik}}{\lambda_i}+\frac{d_{ki}}{\lambda_k}}\left(T_k - T_i\right) + \sum_e \frac{S_{ie}}{\frac{d_{ie}}{\lambda_i}}\left(T_{iBe} - T_i\right) + \sum_d S_{id}\dot{q}_{id} + V_i\dot{Q}_i = 0$$

要素境界面通過熱流束　　体積発熱



λ　：熱伝導率
V_i　：要素体積
S　：表面面積
d_{ij}　：要素中心から表面までの距離
q　：表面フラックス
Q　：体積発熱
T_{iB}　：境界温度

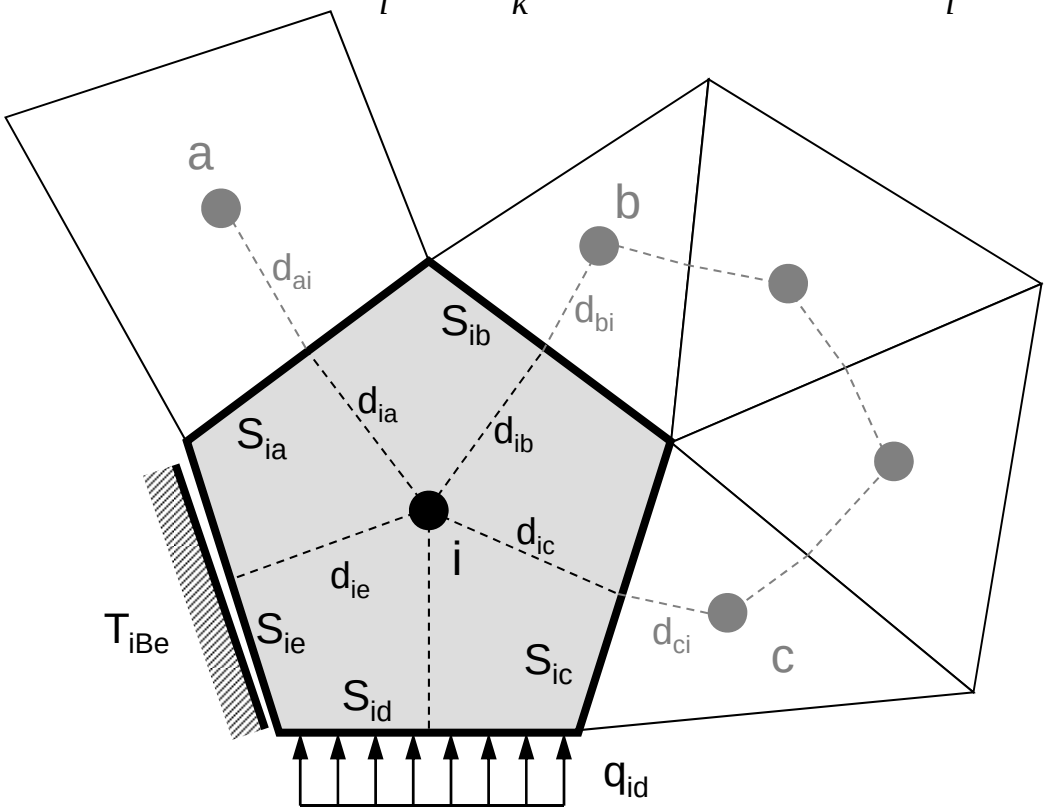
有限体積法による空間離散化

隣接している要素の影響のみ受ける

隣接要素との熱伝導　　温度固定境界

$$\sum_k \frac{S_{ik}}{\frac{d_{ik}}{\lambda_i}+\frac{d_{ki}}{\lambda_k}}\left(T_k - T_i\right) + \sum_e \frac{S_{ie}}{\frac{d_{ie}}{\lambda_i}}\left(T_{iBe} - T_i\right) + \sum_d S_{id}\dot{q}_{id} + V_i\dot{Q}_i = 0$$

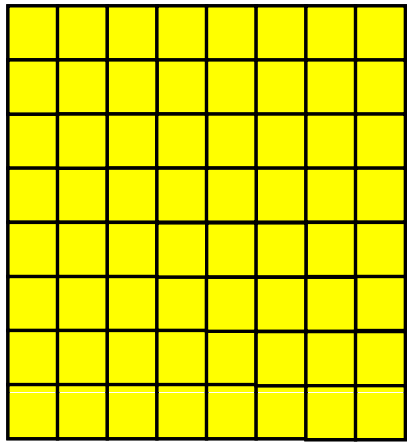
要素境界面通過熱流束　　体積発熱

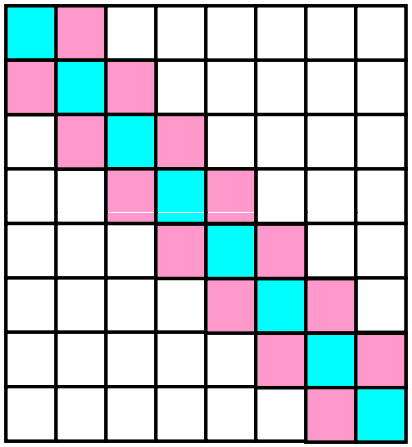


λ　:熱伝導率
V_i　:要素体積
S　:表面面積
d_{ij}　:要素中心から表面までの距離
q　:表面フラックス
Q　:体積発熱
T_{iB}　:境界温度

係数行列は疎行列（Sparse Matrix）

- 0が多い
- 通常「数値解析」などで扱うのは「密行列」
- 非ゼロ成分のみを記憶する方法
  - Compressed Row Storage, CRS（後述）
- 密行列と比較して取り扱いが困難





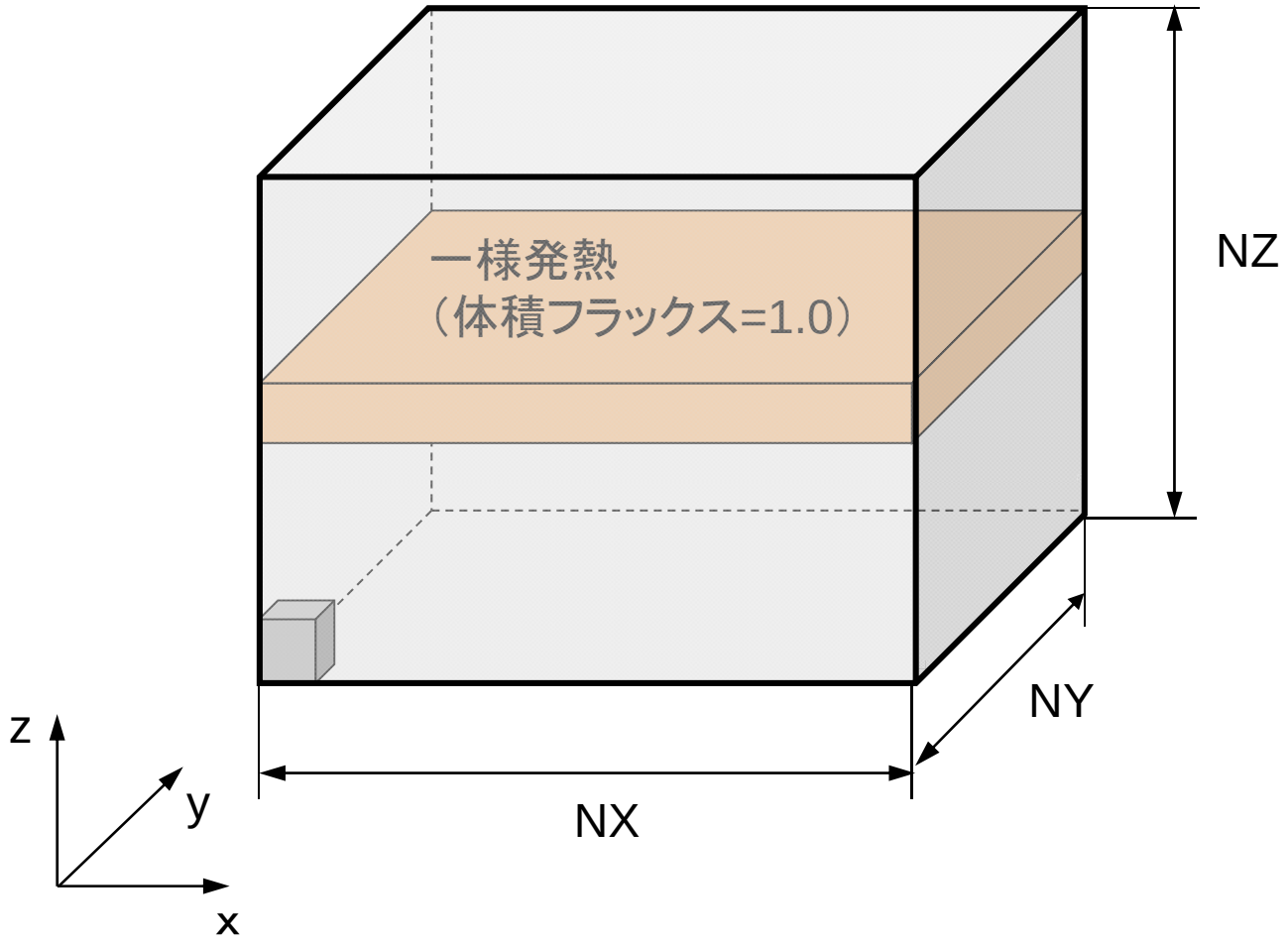
現行コードにおける制限

- 要素形状は六面体のみ。
  - 各要素は各辺長さ1の立方体
  - 全体形状，境界条件等はメッシュジェネレータで規定
- 隣接要素数は要素各面に接する6面までとする。
  - プログラムを変更すれば増やすことは可能

- 境界条件
  - ディリクレ境界条件
  - ノイマン境界条件（面フラックス）
  - 体積発熱
- 要素番号は1から始まって連続していなければならない。

現在対象としている形状，境界条件

プログラムでは，後掲のデータ形式に従えば，任意の形状を扱うことができる



X=Xmax

ディリクレ境界条件

T=0

X=Xmin

ノイマン境界条件

-λ(dT/dX)=1.

- 背景：並列プログラミングの学び方
- 有限体積法の概要
- **1CPU用プログラム eps_fvm**
  - **メッシュ生成，形状データ**
  - 計算実行例
  - プログラムの内容

T2Kで利用できるコンパイラ

- 日立コンパイラ（デフォルト）
- Intel
- PGI
- GNU

- 本講義では「日立コンパイラ」を使用する
  - `mpif90 -Oss –noparallel s1-3.f`
  - `mpicc -Os –noparallel s1-3.c`

ファイルシステム（1/2）

- **/home**
  - 各コースの制限値まで利用可能（クラス全体で4TB）
  - バックアップなし
  - 全ノードで共有
- **/short**
  - 容量無制限
  - 最終アクセスから5日で消える
  - 全ノードで共有
- **/tmp**
  - ノードあたり 140GB
  - ノードローカル
  - バッチジョブ終了時に消える

ファイルシステム（2/2）

- 分散ファイルシステム HSFS
  - 全ノードで共有するファイルシステムにはHSFSが使われている
  - 16台のファイルサーバに負荷分散
  - ユーザーには単一のディレクトリツリーが見える

  - ファイルストライプモード
    - ファイル単位で処理するサーバを割り当てる
    - 同じファイルに多数のノードからアクセスすると破綻する

- 現在はLustreも使えます：速いです
  - **`/lustre/username`**

必要ファイルインストール：T2K

Lustreを使いたければ下記へ移動

```
 $> cd /lustre/t003xx（自分のUID）
```

FORTRAN

```
 $> cp /home/t00000/fvm-f.tar .
 $> tar xvf fvm-f.tar
```

C

```
 $> cp /home/t00000/fvm-c.tar .
 $> tar xvf fvm-c.tar
```

それぞれ直下に fvm-f, fvm-c というディレクトリができます。
これらを今後

```
 <$FVM>
```

と呼びます。

.bash_profile

```
$> cd

*****************************************
$> cp /home/t00000/.bash_profile .

または ~/.bash_profileに以下の2行を挿入

  PATH="$PATH":/home/t00000/bin
  export PATH

*****************************************
$> source .bash_profile
$> printenv

PATHに以下が入っていることを確認

  home/t00000/bin
```

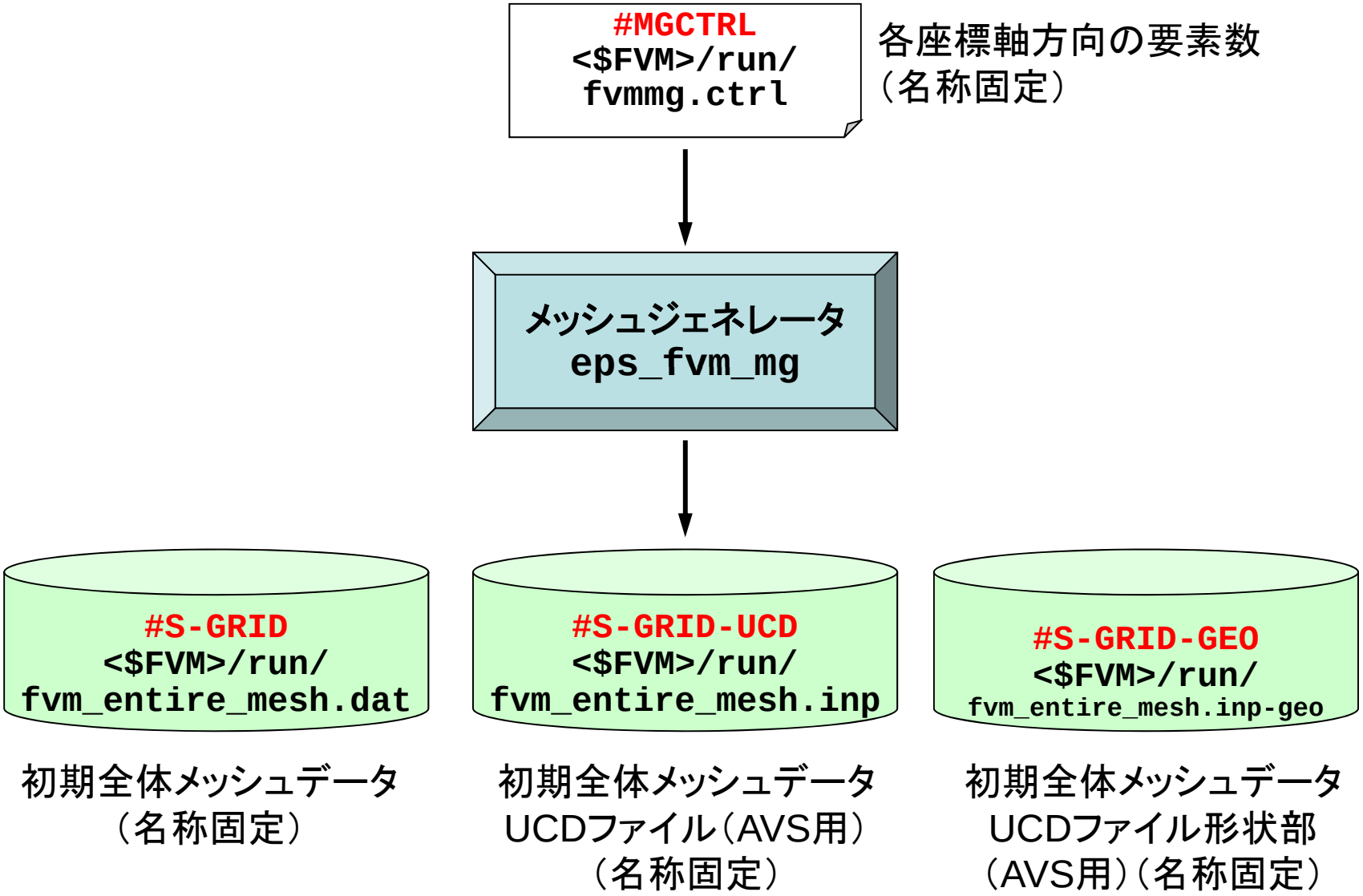
次回からはログイン時に自動的に起動

メッシュ生成からやってみよう

```
$> cd <$FVM>/run
$> cat fvmmg.ctrl
     2  2  3
$> eps_fvm_mg

$> ls fvm_entire*
   fvm_entire_mesh.dat
   fvm_entire_mesh.inp
   fvm_entire_mesh.inp_geo
```

- 入力
  - **fvmmg.ctrl**:各座標軸方向の要素数（NX,NY,NZ） **#MGCTRL**
    - この場合2×2×3=12個の要素が生成される
- 出力
  - **fvm_entire_mesh.dat**: 初期全体メッシュデータ **#S-GRID**
  - **fvm_entire_mesh.inp**: AVS表示用ファイル **#S-GRID-UCD**
    - メッシュ形状をmicroAVSで表示するためのファイル
  - **fvm_entire_mesh.inp-geo**:AVS表示用形状ファイル **#S-GRID-GEO**

メッシュ生成：専用ツール使用



初期全体メッシュデータ（例）（1/6）

http://nkl.cc.u-tokyo.ac.jp/tutorial/part_tutorial

```
 12
  1    1.000000E+00    1.000000E+00    5.000000E-01    5.000000E-01    5.000000E-01
  2    1.000000E+00    1.000000E+00    1.500000E+00    5.000000E-01    5.000000E-01
  3    1.000000E+00    1.000000E+00    5.000000E-01    1.500000E+00    5.000000E-01
  4    1.000000E+00    1.000000E+00    1.500000E+00    1.500000E+00    5.000000E-01
  5    1.000000E+00    1.000000E+00    5.000000E-01    5.000000E-01    1.500000E+00
  6    1.000000E+00    1.000000E+00    1.500000E+00    5.000000E-01    1.500000E+00
  7    1.000000E+00    1.000000E+00    5.000000E-01    1.500000E+00    1.500000E+00
  8    1.000000E+00    1.000000E+00    1.500000E+00    1.500000E+00    1.500000E+00
  9    1.000000E+00    1.000000E+00    5.000000E-01    5.000000E-01    2.500000E+00
 10    1.000000E+00    1.000000E+00    1.500000E+00    5.000000E-01    2.500000E+00
 11    1.000000E+00    1.000000E+00    5.000000E-01    1.500000E+00    2.500000E+00
 12    1.000000E+00    1.000000E+00    1.500000E+00    1.500000E+00    2.500000E+00
 20
  1         2    1.000000E+00    5.000000E-01    5.000000E-01
  1         3    1.000000E+00    5.000000E-01    5.000000E-01
  1         5    1.000000E+00    5.000000E-01    5.000000E-01
  2         4    1.000000E+00    5.000000E-01    5.000000E-01
  2         6    1.000000E+00    5.000000E-01    5.000000E-01
  3         4    1.000000E+00    5.000000E-01    5.000000E-01
  3         7    1.000000E+00    5.000000E-01    5.000000E-01
  4         8    1.000000E+00    5.000000E-01    5.000000E-01
  5         6    1.000000E+00    5.000000E-01    5.000000E-01
  5         7    1.000000E+00    5.000000E-01    5.000000E-01
  5         9    1.000000E+00    5.000000E-01    5.000000E-01
  6         8    1.000000E+00    5.000000E-01    5.000000E-01
  6        10    1.000000E+00    5.000000E-01    5.000000E-01
  7         8    1.000000E+00    5.000000E-01    5.000000E-01
  7        11    1.000000E+00    5.000000E-01    5.000000E-01
  8        12    1.000000E+00    5.000000E-01    5.000000E-01
  9        10    1.000000E+00    5.000000E-01    5.000000E-01
  9        11    1.000000E+00    5.000000E-01    5.000000E-01
 10        12    1.000000E+00    5.000000E-01    5.000000E-01
 11        12    1.000000E+00    5.000000E-01    5.000000E-01
  6
  2    1.000000E+00    5.000000E-01    0.000000E+00
  4    1.000000E+00    5.000000E-01    0.000000E+00
  6    1.000000E+00    5.000000E-01    0.000000E+00
  8    1.000000E+00    5.000000E-01    0.000000E+00
 10    1.000000E+00    5.000000E-01    0.000000E+00
 12    1.000000E+00    5.000000E-01    0.000000E+00
  6
  1    1.000000E+00    1.000000E+00
  3    1.000000E+00    1.000000E+00
  5    1.000000E+00    1.000000E+00
  7    1.000000E+00    1.000000E+00
  9    1.000000E+00    1.000000E+00
 11    1.000000E+00    1.000000E+00
  4
  5    1.000000E+00
  6    1.000000E+00
  7    1.000000E+00
  8    1.000000E+00
```

各要素情報

要素間コネクティビティ
面に隣接する要素

ディリクレ境界条件
温度固定

ノイマン境界条件
境界熱流束

体積発熱

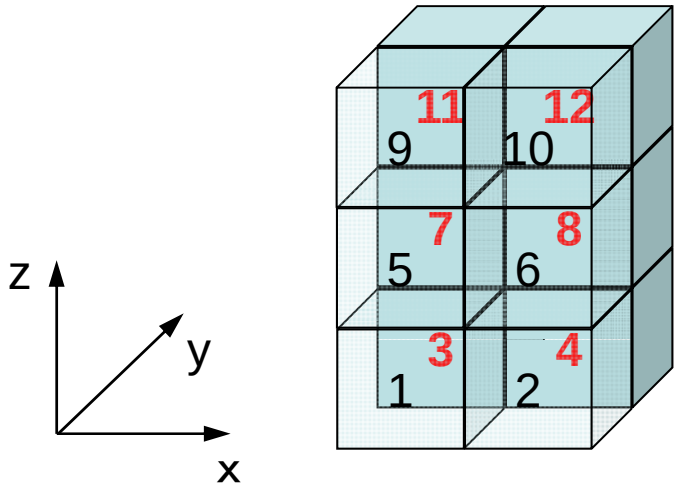
変数表

変数名	型	配列サイズ	内容
NODE_tot	I	-	総要素数
NODE_VOL(:)	R	NODE_tot	要素体積
NODE_COND(:)	R	NODE_tot	要素熱伝導率
NODE_XYZ(:)	R	3*NODE_tot	要素重心座標（3次元）
CONN_tot	I	-	コネクティビティ総数
CONN_node(:)	I	2*CONN_tot	コネクティビティ構成要素
CONN_COEF(:)	R	CONN_tot	コネクティビティ係数
FIX_NODE_tot	I	-	ディリクレ境界条件適用要素数
FIX_NODE_ID(:)	I	FIX_NODE_tot	ディリクレ境界条件適用要素番号
FIX_NODE_COEF(:)	R	FIX_NODE_tot	ディリクレ境界条件係数
FIX_NODE_VAL(:)	R	FIX_NODE_tot	ディリクレ境界条件値
SURF_NODE_tot	I	-	ノイマン境界条件適用要素数
SURF_NODE_ID(:)	I	SURF_NODE_tot	ノイマン境界条件適用要素番号
SURF_NODE_FLUX(:)	R	SURF_NODE_tot	ノイマン境界条件フラックス
BODY_NODE_tot	I	-	体積発熱境界条件適用要素数
BODY_NODE_ID(:)	I	BODY_NODE_tot	体積発熱境界条件適用要素番号
BODY_NODE_FLUX(:)	R	BODY_NODE_tot	体積発熱境界条件フラックス

初期全体メッシュデータ（例）（2/6）

各要素

```
12   要素数:NODE_tot
 1       1.000000E+00    1.000000E+00    5.000000E-01    5.000000E-01    5.000000E-01
 2       1.000000E+00    1.000000E+00    1.500000E+00    5.000000E-01    5.000000E-01
 3       1.000000E+00    1.000000E+00    5.000000E-01    1.500000E+00    5.000000E-01
 4       1.000000E+00    1.000000E+00    1.500000E+00    1.500000E+00    5.000000E-01
 5       1.000000E+00    1.000000E+00    5.000000E-01    5.000000E-01    1.500000E+00
 6       1.000000E+00    1.000000E+00    1.500000E+00    5.000000E-01    1.500000E+00
 7       1.000000E+00    1.000000E+00    5.000000E-01    1.500000E+00    1.500000E+00
 8       1.000000E+00    1.000000E+00    1.500000E+00    1.500000E+00    1.500000E+00
 9       1.000000E+00    1.000000E+00    5.000000E-01    5.000000E-01    2.500000E+00
10       1.000000E+00    1.000000E+00    1.500000E+00    5.000000E-01    2.500000E+00
11       1.000000E+00    1.000000E+00    5.000000E-01    1.500000E+00    2.500000E+00
12       1.000000E+00    1.000000E+00    1.500000E+00    1.500000E+00    2.500000E+00
要素番号 要素体積        要素熱伝導率     要素中心X座標    要素中心Y座標    要素中心Z座標
         NODE_VOL(i)     NODE_COND(i)    NODE_XYZ(3*i-2) NODE_XYZ(3*i-1) NODE_XYZ(3*i)
```

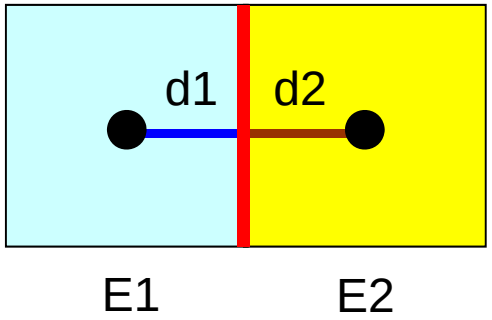


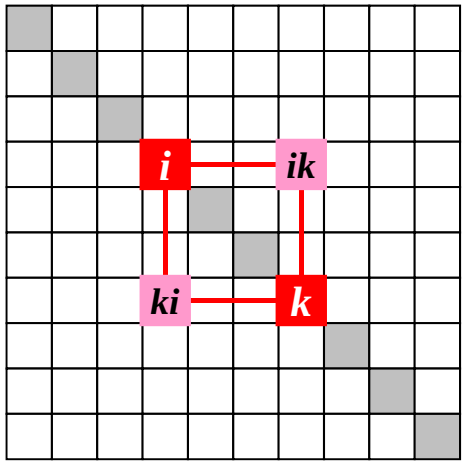

```
read (IUNIT, '(10i10)') NODE_tot
do i= 1, NODE_tot
  read (IUNIT,'(i10,5e16.6)')                    &
        ii, NODE_VOL(i), NODE_COND(i),           &
        (NODE_XYZ(3*i-3+k), k=1, 3)
enddo
```

初期全体メッシュデータ（例）（3/6）

要素間コネクティビティ：ある面に接続する2要素

```
20  コネクティビティ総数: CONN_tot
 1          2    1.000000E+00    5.000000E-01    5.000000E-01
 1          3    1.000000E+00    5.000000E-01    5.000000E-01
 1          5    1.000000E+00    5.000000E-01    5.000000E-01
 2          4    1.000000E+00    5.000000E-01    5.000000E-01
 2          6    1.000000E+00    5.000000E-01    5.000000E-01
 3          4    1.000000E+00    5.000000E-01    5.000000E-01
 3          7    1.000000E+00    5.000000E-01    5.000000E-01
 4          8    1.000000E+00    5.000000E-01    5.000000E-01
 5          6    1.000000E+00    5.000000E-01    5.000000E-01
 5          7    1.000000E+00    5.000000E-01    5.000000E-01
 5          9    1.000000E+00    5.000000E-01    5.000000E-01
 6          8    1.000000E+00    5.000000E-01    5.000000E-01
 6         10    1.000000E+00    5.000000E-01    5.000000E-01
 7          8    1.000000E+00    5.000000E-01    5.000000E-01
 7         11    1.000000E+00    5.000000E-01    5.000000E-01
 8         12    1.000000E+00    5.000000E-01    5.000000E-01
 9         10    1.000000E+00    5.000000E-01    5.000000E-01
 9         11    1.000000E+00    5.000000E-01    5.000000E-01
10         12    1.000000E+00    5.000000E-01    5.000000E-01
11         12    1.000000E+00    5.000000E-01    5.000000E-01
E1         E2    S:要素境界面積    d1:E1重心～      d2:E2重心～
                                     境界面距離       境界面距離

E1= CONN_NODE(2*ic-1)
E2= CONN_NODE(2*ic)
```





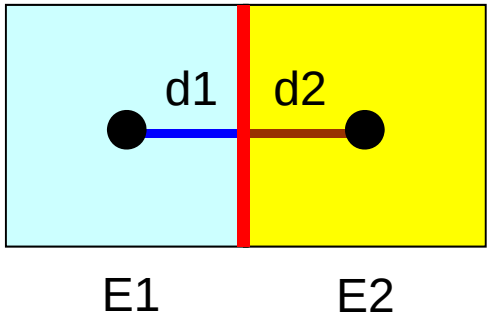
係数行列の非対角成分

```
read (IUNIT,'(10i10)') CONN_tot
do i= 1, CONN_tot
  read (IUNIT,'( 2i10, 3e16.6)')          &
        (CONN_NODE(2*i-2+k), k= 1, 2),    &
         AREA, d1, d2
enddo
```

初期全体メッシュデータ(例)(3/6)

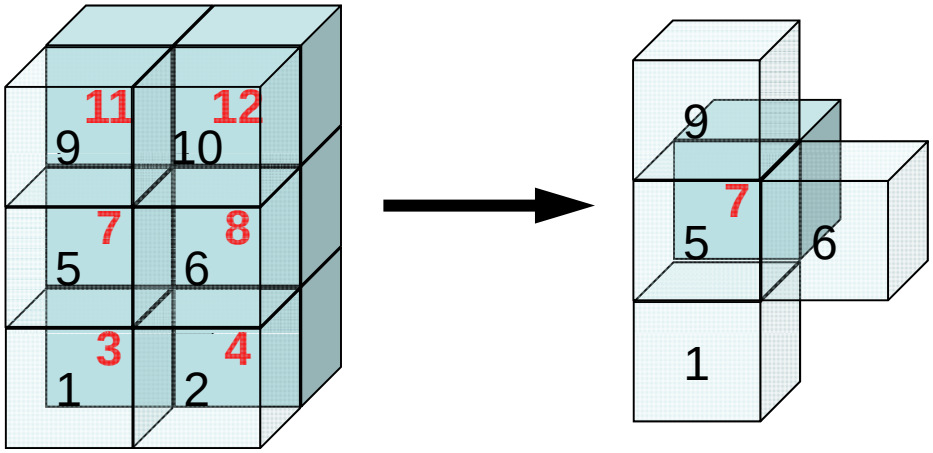
要素間コネクティビティ:5番要素に着目

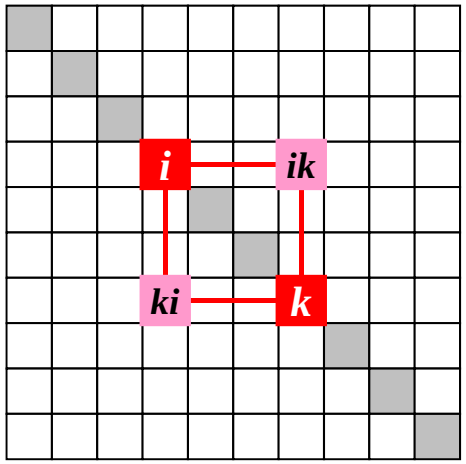
E1	E2	S:要素境界面積	d1:E1重心～境界面距離	d2:E2重心～境界面距離
1	5	1.0E+00	5.0E-01	5.0E-01
5	6	1.0E+00	5.0E-01	5.0E-01
5	7	1.0E+00	5.0E-01	5.0E-01
5	9	1.0E+00	5.0E-01	5.0E-01



各要素は一辺の長さ1の立方体:

- 要素境界面積は1×1=1
- 各要素重心から境界面までの距離は0.50





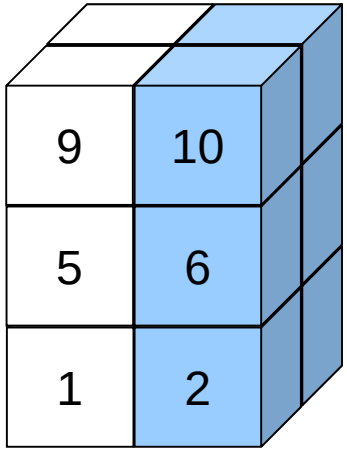
係数行列の非対角成分

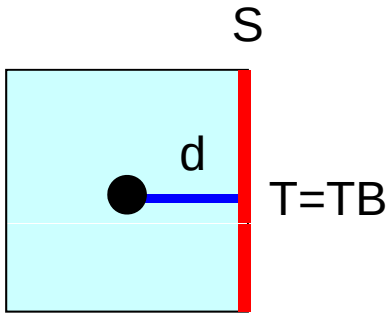
初期全体メッシュデータ（例）（4/6）

ディリクレ境界条件（表面温度固定）

```
 6   ディリクレ境界条件を与える要素数: FIX_NODE_tot
 2       1.000000E+00    5.000000E-01    0.000000E+00
 4       1.000000E+00    5.000000E-01    0.000000E+00
 6       1.000000E+00    5.000000E-01    0.000000E+00
 8       1.000000E+00    5.000000E-01    0.000000E+00
10       1.000000E+00    5.000000E-01    0.000000E+00
12       1.000000E+00    5.000000E-01    0.000000E+00
要素番号   境界面面積S      境界面と要素重心距離d   境界値TB
FIX_NODE_ID(ib)                          FIX_NODE_VAL(ib)
```

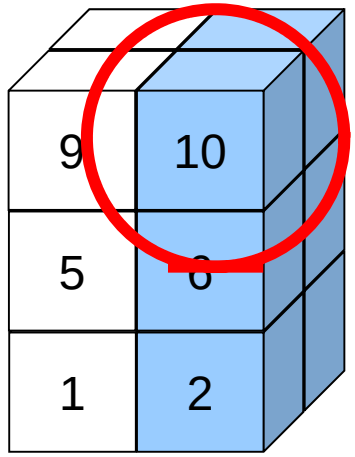
```
read (IUNIT,'(10i10)') FIX_NODE_tot
do i= 1, FIX_NODE_tot
  read (IUNIT, '(i10, 3e16.6)')          &
        FIX_NODE_ID(i), S, d,            &
        FIX_NODE_VAL(i)
enddo
```



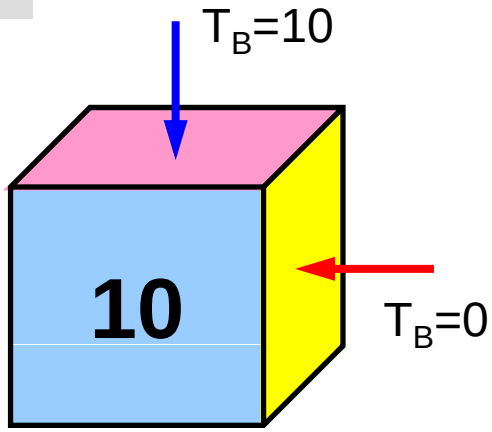


1つの「要素」に複数のディリクレ境界条件を与えることも実は可能

```
 7   ディリクレ境界条件を与える要素数: FIX_NODE_tot
 2       1.000000E+00    5.000000E-01    0.000000E+00
 4       1.000000E+00    5.000000E-01    0.000000E+00
 6       1.000000E+00    5.000000E-01    0.000000E+00
 8       1.000000E+00    5.000000E-01    0.000000E+00
10       1.000000E+00    5.000000E-01    0.000000E+00
12       1.000000E+00    5.000000E-01    0.000000E+00
10       1.000000E+00    5.000000E-01    1.000000E+01
要素番号   境界面面積S      境界面と要素重心距離d   境界値TB
FIX_NODE_ID(ib)
FIX_NODE_VAL(ib)
```



ある表面の温度を規定するだけであって，その要素の温度自体（要素中心）を規定するわけではない。「要素数」というよりは「面数」という方がより正確。



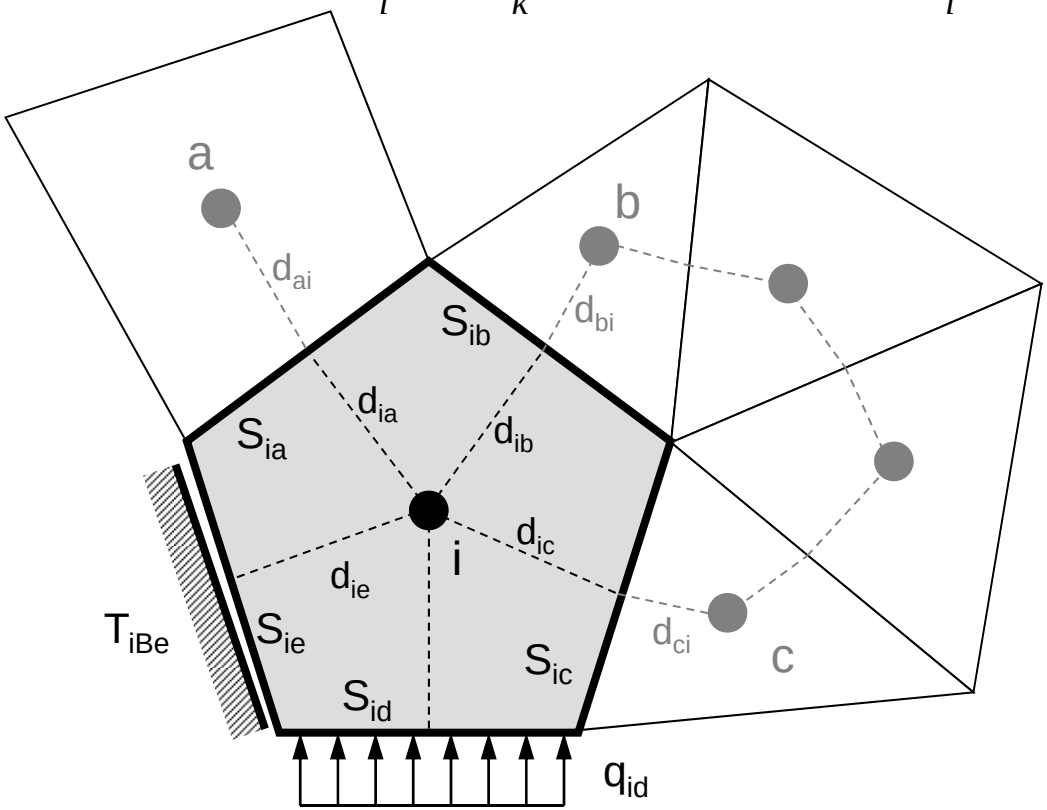
有限体積法による空間離散化

熱流束に関するつりあい式

隣接要素との熱伝導　　温度固定境界

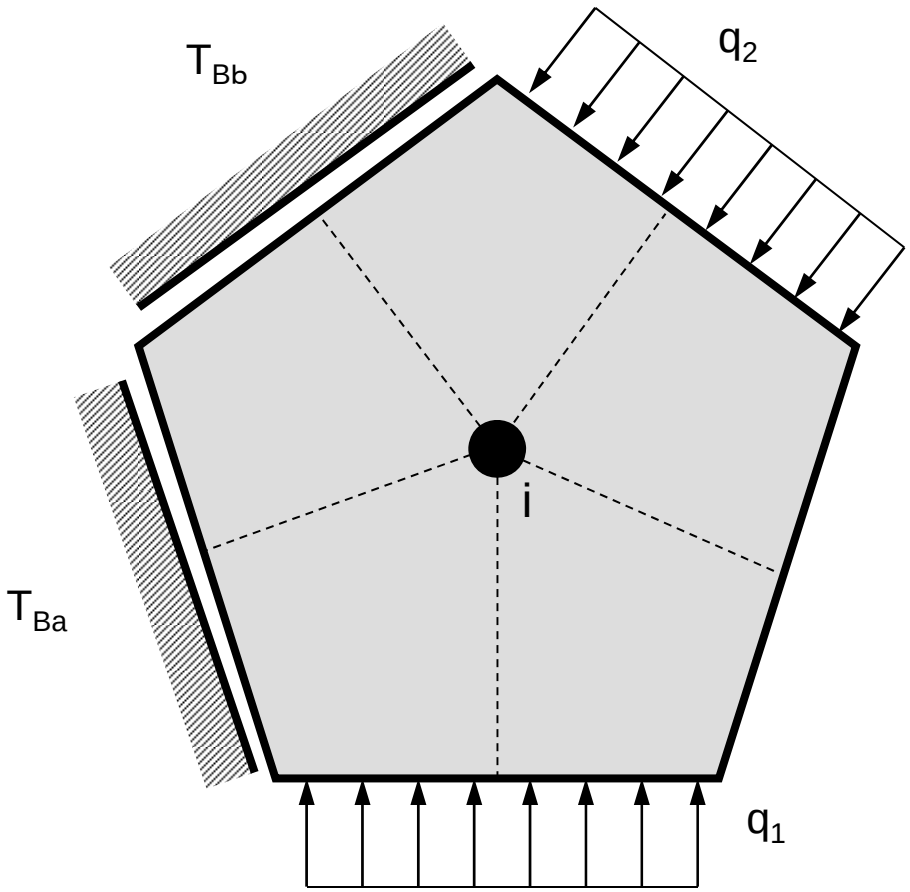
$$\sum_k \frac{S_{ik}}{\frac{d_{ik}}{\lambda_i}+\frac{d_{ki}}{\lambda_k}}\left(T_k - T_i\right) + \sum_e \frac{S_{ie}}{\frac{d_{ie}}{\lambda_i}}\left(T_{iBe} - T_i\right) + \sum_d S_{id}\dot{q}_{id} + V_i\dot{Q}_i = 0$$

要素境界面通過熱流束　　体積発熱



λ　：熱伝導率
V_i　：要素体積
S　：表面面積
d_{ij}　：要素中心から表面までの距離
q　：表面フラックス
Q　：体積発熱
T_{iB}　：境界温度

各要素に適用できる境界条件の数に制限は無い

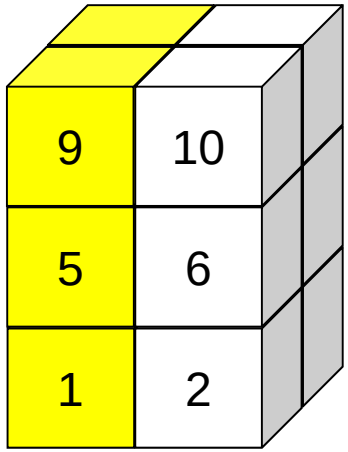


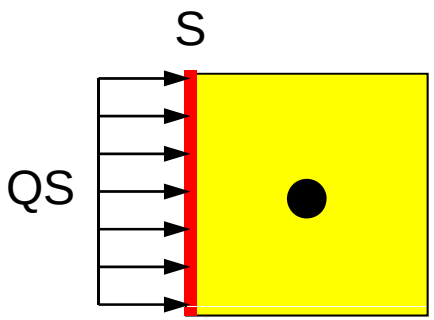
初期全体メッシュデータ（例）（5/6）

ノイマン境界条件（表面熱フラックス：W/m^2）

```
 6   ノイマン境界条件を与える要素数: SURF_NODE_tot
 1       1.000000E+00    1.000000E+00
 3       1.000000E+00    1.000000E+00
 5       1.000000E+00    1.000000E+00
 7       1.000000E+00    1.000000E+00
 9       1.000000E+00    1.000000E+00
11       1.000000E+00    1.000000E+00
要素番号   境界表面積S       表面フラックスQS
SURF_NODE_ID(ib)
```

```
read (IUNIT,'(10i10)') SURF_NODE_tot
do i= 1, SURF_NODE_tot
  read (IUNIT, '(i10, 3e16.6)')          &
        SURF_NODE_ID(i), S, QS
enddo
```





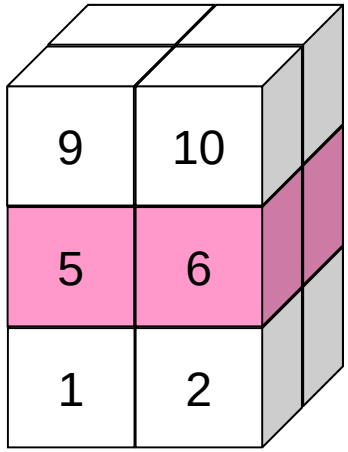
1つの要素に複数のノイマン境界条件を適用することは可能（複数の面に異なった熱流束を与える）。

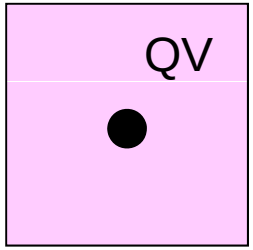
初期全体メッシュデータ（例）（6/6）

体積発熱（W/m^3）

```
 4   体積発熱を与える要素数
 5       1.000000E+00
 6       1.000000E+00
 7       1.000000E+00
 8       1.000000E+00
要素番号   体積フラックスQV
```

```
read (IUNIT,'(10i10)') BODY_NODE_tot
do i= 1, BODY_NODE_tot
  read (IUNIT, '(i10, 3e16.6)') icel, QV
enddo
```



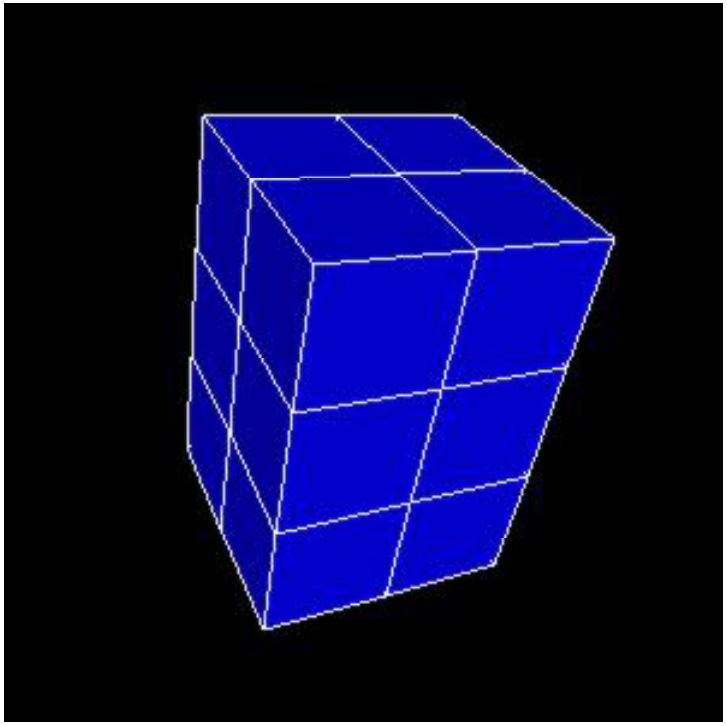


同じ要素に対して，複数回体積発熱を指定した場合には，一番最後に指定した値が適用される。

MicroAVSによる表示

#S-GRID-UCD:

<$FVM>/run/fvm_entire_mesh.inp



- AVS, microAVSのUCDファイルフォーマット（Unstructured Cell Data）を使用。
  - http://kgt.cybernet.co.jp/

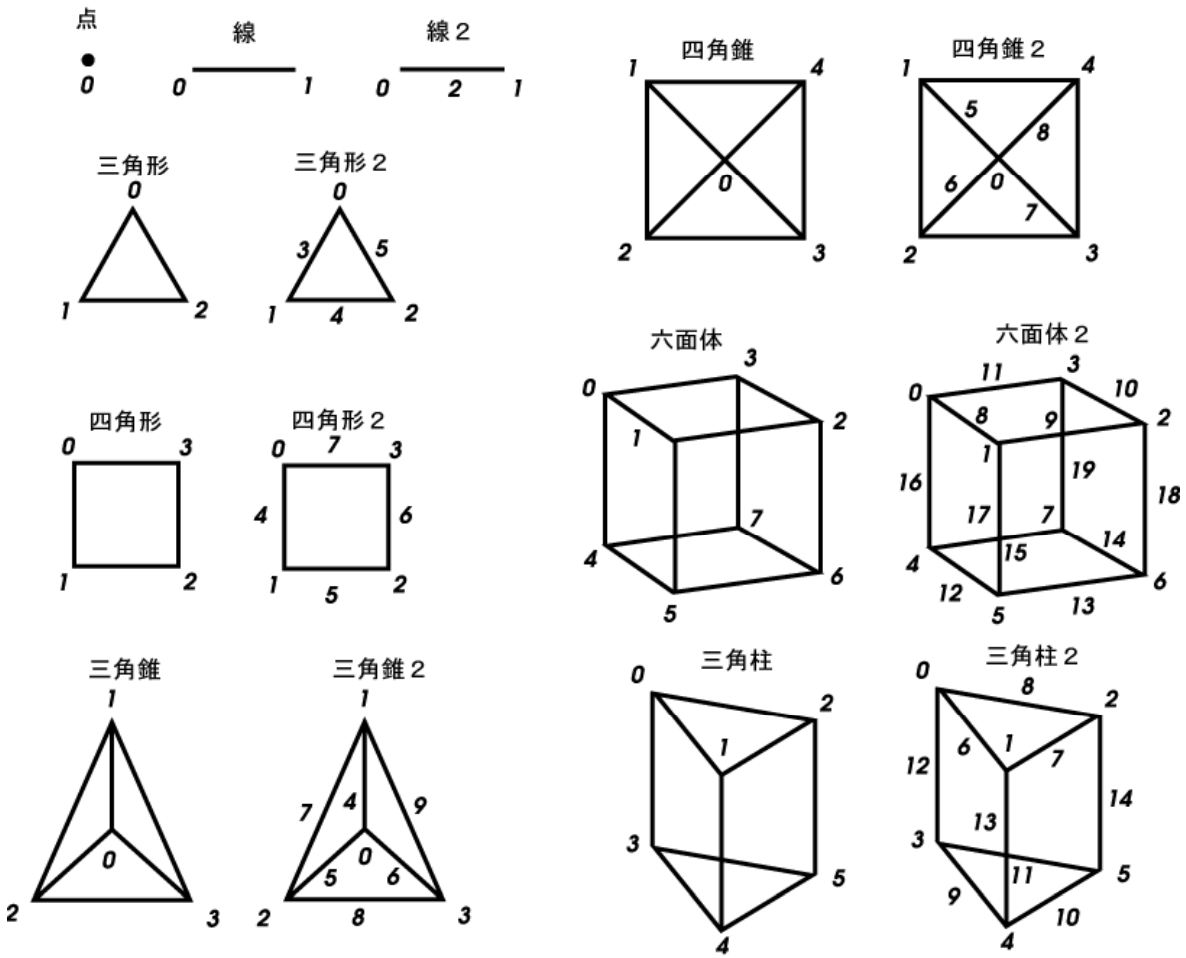
MicroAVSの使用

- 手順は以下
  - http://nkl.cc.u-tokyo.ac.jp/10e/mavs/

UCDフォーマットについて（1/4）

MicroAVSで扱うことのできる要素形状

要素の種類	キーワード
点	pt
線	line
三角形	tri
四角形	quad
四面体	tet
角錐	pyr
三角柱	prism
六面体	hex
二次要素	
線2	line2
三角形2	tri2
四角形2	quad2
四面体2	tet2
角錐2	pyr2
三角柱2	prism2
六面体2	hex2



UCDフォーマットについて（2/4）
書式の概要

- ファイルの拡張子
  - データファイルの拡張子は “.inp”
- 書式
  - アスキーファイル
  - 時系列（複数ステップ）に対応したものが標準フォーマット
  - MicroAVS Ver.6.0（現在はVer.13.0）まで使用していた旧フォーマット（単一ステップデータのための書式）も読み込むことは可能
    - 実は一部これを使用している

UCDフォーマットについて（4/3）

書式の概要

(コメント行)
(ステップ数)
(データの繰り返しタイプ)
(ステップ番号1) (コメント)
(全節点数) (全要素数)
(節点番号1) (X座標) (Y座標) (Z座標)
(節点番号2) (X座標) (Y座標) (Z座標)

.
.
.

(要素番号1) (材料番号) (要素の種類) (要素を構成する節点のつながり)
(要素番号2) (材料番号) (要素の種類) (要素を構成する節点のつながり)

.
.
.

(各節点のデータ数) (各要素のデータ数)
(節点のデータ成分数) (成分1の構成数) (成分2の構成数) ･･･(各成分の構成数)
(節点データ成分1のラベル), (単位)
(節点データ成分2のラベル), (単位)

.
.
.

(各節点データ成分のラベル), (単位)
(節点番号1) (節点データ1) (節点データ2) ･････
(節点番号2) (節点データ1) (節点データ2) ･････

.
.
.

(要素のデータ成分数) (成分1の構成数) (成分2の構成数) ･･･(各成分の構成数)
(要素データ成分1のラベル), (単位)
(要素データ成分2のラベル), (単位)

.
.
.

(各要素データ成分のラベル), (単位)
(要素番号1) (要素データ1) (要素データ2) ･････
(要素番号2) (要素データ1) (要素データ2) ･････

.
.
.

(ステップ番号2) (コメント) (全節点数) (全要素数)
.
.
.

UCDフォーマットについて（4/4）

旧フォーマット

(全節点数) (全要素数) (各節点のデータ数) (各要素のデータ数) (モデルのデータ数)
(節点番号1) (X座標) (Y座標) (Z座標)
(節点番号2) (X座標) (Y座標) (Z座標)

.
.
.

(要素番号1) (材料番号) (要素の種類) (要素を構成する節点のつながり)
(要素番号2) (材料番号) (要素の種類) (要素を構成する節点のつながり)

.
.
.

(節点のデータ成分数) (成分1の構成数) (成分2の構成数) ･･･(各成分の構成数)
(節点データ成分1のラベル), (単位)
(節点データ成分2のラベル), (単位)

.
.
.

(各節点データ成分のラベル), (単位)
(節点番号1) (節点データ1) (節点データ2) ･････
(節点番号2) (節点データ1) (節点データ2) ･････

.
.
.

(要素のデータ成分数) (成分1の構成数) (成分2の構成数) ･･･(各成分の構成数)
(要素データ成分1のラベル), (単位)
(要素データ成分2のラベル), (単位)

.
.
.

(各要素データ成分のラベル), (単位)
(要素番号1) (要素データ1) (要素データ2) ･････
(要素番号2) (要素データ1) (要素データ2) ･････

.
.
.

UCDデータの例

新フォーマット

```
#
1
data
step1
36  12
 1  0.0  0.0  0.0
 2  1.0  0.0  0.0
 3  2.0  0.0  0.0
 4  0.0  1.0  0.0
 5  1.0  1.0  0.0
 6  2.0  1.0  0.0
…
31  0.0  1.0  3.0
32  1.0  1.0  3.0
33  2.0  1.0  3.0
34  0.0  2.0  3.0
35  1.0  2.0  3.0
36  2.0  2.0  3.0
 1 1 hex   1   2   5   4  10  11  14  13
 2 1 hex   2   3   6   5  11  12  15  14
 3 1 hex   4   5   8   7  13  14  17  16
…
10 1 hex  20  21  24  23  29  30  33  32
11 1 hex  22  23  26  25  31  32  35  34
12 1 hex  23  24  27  26  32  33  36  35
0 1
1 1
Mesh,
 1  1.00
 2  1.00
 3  1.00
 4  1.00
…
10  1.00
11  1.00
12  1.00
```

旧フォーマット

```
36  12  0  1  0
 1  0.0  0.0  0.0
 2  1.0  0.0  0.0
 3  2.0  0.0  0.0
 4  0.0  1.0  0.0
 5  1.0  1.0  0.0
 6  2.0  1.0  0.0
…
31  0.0  1.0  3.0
32  1.0  1.0  3.0
33  2.0  1.0  3.0
34  0.0  2.0  3.0
35  1.0  2.0  3.0
36  2.0  2.0  3.0
 1 1 hex   1   2   5   4  10  11  14  13
 2 1 hex   2   3   6   5  11  12  15  14
 3 1 hex   4   5   8   7  13  14  17  16
…
10 1 hex  20  21  24  23  29  30  33  32
11 1 hex  22  23  26  25  31  32  35  34
12 1 hex  23  24  27  26  32  33  36  35
1 1
Mesh,
 1  1.00
 2  1.00
 3  1.00
 4  1.00
…
10  1.00
11  1.00
12  1.00
```

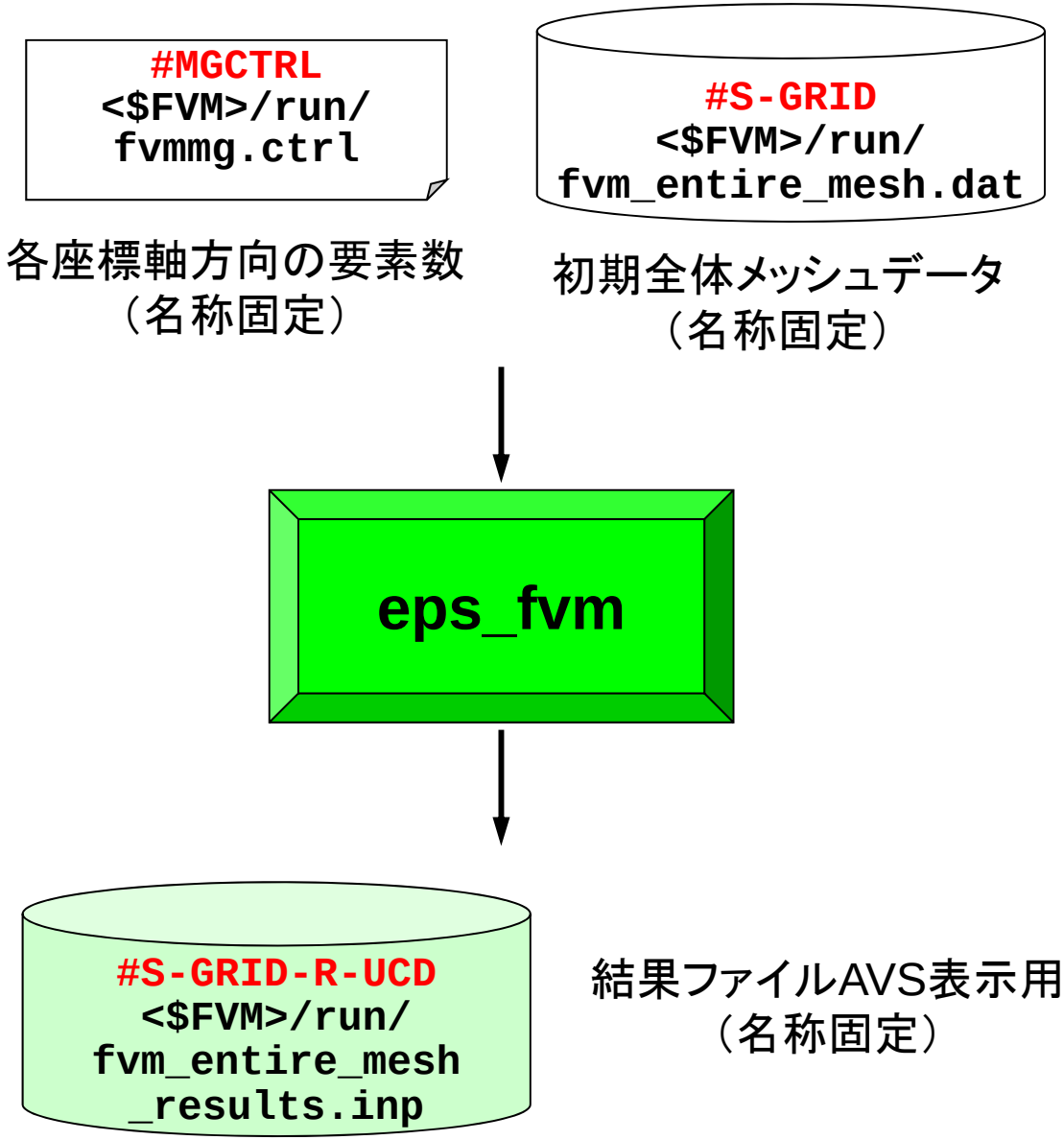
- 背景：並列プログラミングの学び方
- 有限体積法の概要
- 1CPU用プログラム **eps_fvm**
  - メッシュ生成，形状データ
  - **計算実行例**
  - プログラムの内容

「eps_fvm」計算の実行

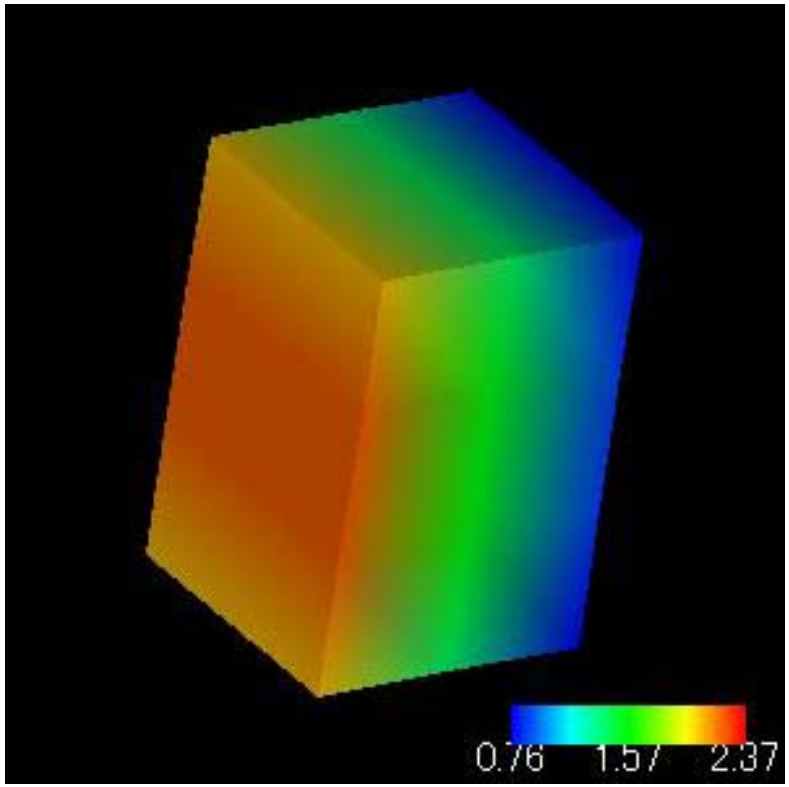
```
$> cd <$FVM>/serial
$> make
…
$> cd ../run
$> ls eps_fvm                    ロードモジュールの生成確認
     eps_fvm

$> ./eps_fvm
```

- 実行形式 **eps_fvm**は**<$FVM>/run** に生成される。
- 入力
  - **<$FVM>/run/fvmmg.ctrl** **#MGCTRL**
  - **<$FVM>/run/fvm_entire_mesh.dat** **#S-GRID**
  - ファイルを**<$FVM>/run**に予め生成しておく必要がある。
- 出力
  - **<$FVM>/run/fvm_entire_mesh_results.inp**（名称固定）
    - MicroAVS用結果出力 **#S-GRID-R-UCD**

シミュレーションコード：eps_fvm



計算結果



- 「**fvm_entire_mesh_results.inp**」をMicroAVSによって処理することができる。

- 背景：並列プログラミングの学び方
- 有限体積法の概要
- 1CPU用プログラム **eps_fvm**
  - メッシュ生成，形状データ
  - 計算実行例
  - プログラムの内容

プログラムの概要

```
$> cd <$FVM>/serial
$> cat eps_fvm.f
```

メインプログラム

```
      program eps_fvm

      use eps_fvm_all
      implicit REAL*8 (A-H,O-Z)

      call eps_fvm_input_grid
      call poi_gen
      call eps_fvm_solve

      call output_ucd

      end program eps_fvm
```

「eps_fvm」処理：メイン（1/2）

eps_fvm_all

```
program eps_fvm
use eps_fvm_all

implicit REAL*8 (A-H,O-Z)

call eps_fvm_input_grid
call poi_gen
call eps_fvm_solver
call output_ucd

end program eps_fvm
```

変数の内容について記載したモジュールブロック（コモンブロックのようなもの）。

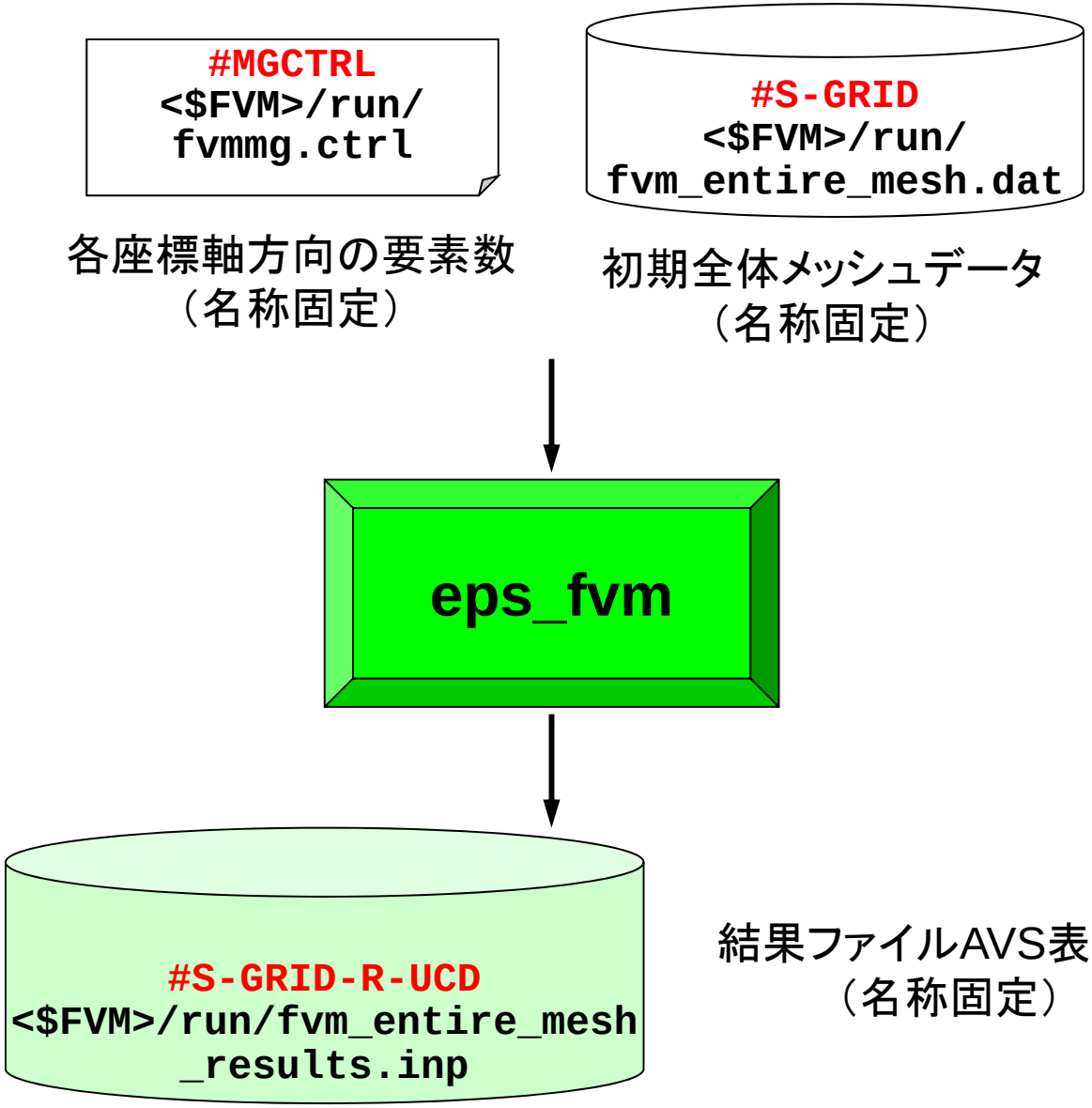
詳細はチュートリアル参照

http://nkl.cc.u-tokyo.ac.jp/tutorial/eps_fvm_tutorial/

http://nkl.cc.u-tokyo.ac.jp/tutorial/eps_fvm_tutorial.tar

```
module eps_fvm_all
  use eps_fvm_util
  use eps_fvm_pcg
  use appl_cntl
end module eps_fvm_all
```

eps_fvm の処理


#MGCTRL
<$FVM>/run/
fvmmg.ctrl
#S-GRID
<$FVM>/run/
fvm_entire_mesh.dat
各座標軸方向の要素数
（名称固定）
初期全体メッシュデータ
（名称固定）
eps_fvm
#S-GRID-R-UCD
<$FVM>/run/fvm_entire_mesh
_results.inp
結果ファイルAVS表示用
（名称固定）

「eps_fvm」処理：メイン（2/2）
その他

```
program eps_fvm
use eps_fvm_all

implicit REAL*8 (A-H,O-Z)

call eps_fvm_input_grid          メッシュ読み込み(#S-GRID)
call poi_gen                     マトリクス生成
call eps_fvm_solver              線形ソルバー
call output_ucd                  AVS用結果ファイル書き出し(S-GRID-R-UCD)

end program eps_fvm
```

```
program eps_fvm
use eps_fvm_all

implicit REAL*8 (A-H,O-Z)

call eps_fvm_input_grid          メッシュ読み込み(#S-GRID)
call poi_gen                     マトリクス生成
call eps_fvm_solver              線形ソルバー
call output_ucd                  AVS用結果ファイル書き出し(S-GRID-R-UCD)

end program eps_fvm
```

メッシュ関連変数（eps_fvm_util）

変数名	型	配列サイズ	内容
NODE_tot	I	-	要素数
NODE_VOL(:)	R	NODE_tot	要素体積
NODE_COND(:)	R	NODE_tot	要素熱伝導率
NODE_XYZ(:)	R	3*NODE_tot	要素重心座標（3次元）
CONN_tot	I	-	コネクティビティ総数
CONN_node(:)	I	2*CONN_tot	コネクティビティ構成要素
CONN_COEF(:)	R	CONN_tot	コネクティビティ係数
FIX_NODE_tot	I	-	ディリクレ境界条件適用要素数
FIX_NODE_ID(:)	I	FIX_NODE_tot	ディリクレ境界条件適用要素番号
FIX_NODE_COEF(:)	R	FIX_NODE_tot	ディリクレ境界条件係数
FIX_NODE_VAL(:)	R	FIX_NODE_tot	ディリクレ境界条件値
SURF_NODE_tot	I	-	ノイマン境界条件適用要素数
SURF_NODE_ID(:)	I	SURF_NODE_tot	ノイマン境界条件適用要素番号
SURF_NODE_FLUX(:)	R	SURF_NODE_tot	ノイマン境界条件フラックス
BODY_NODE_tot	I	-	体積発熱境界条件適用要素数
BODY_NODE_ID(:)	I	BODY_NODE_tot	体積発熱境界条件適用要素番号
BODY_NODE_FLUX(:)	R	BODY_NODE_tot	体積発熱境界条件フラックス

「eps_fvm」処理：メッシュ読み込み（1/5）

```
      subroutine eps_fvm_input_grid
      use hpcmw_eps_fvm_all
      implicit REAL*8 (A-H,O-Z)

      character(len=NAME_LEN) :: member
      character(len=80       ) :: LINE

!C
!C +------------+
!C | MESH INPUT |
!C +------------+
!C===
      open (22, file='fvmmg.ctrl', status='unknown')
        read (22,*) NX, NY, NZ
      close (22)

      IUNIT= 11
      open (IUNIT,file= ‘fvm_entire_mesh.dat', status='unknown')

!C
!C-- NODE
      read (IUNIT, '(10i10)') NODE_tot

      if (NODE_tot.ne.NX*NY*NZ) then
        write (*,'(a)') "incosistent test.grid and test.mesh !!!"
        call hpcmw_eps_fvm_abort
      endif

      allocate (NODE_VOL(NODE_tot), NODE_COND(NODE_tot),                &
     &          NODE_XYZ(3*NODE_tot))

      do i= 1, NODE_tot
        read (IUNIT,'(i10,5e16.6)') ii, NODE_VOL(i), NODE_COND(i),      &
     &                              (NODE_XYZ(3*i-3+k), k=1, 3)
      enddo
```

各座標軸方向の要素数，AVS出力用に必要

各要素情報の読み込み

NODE_tot：
総要素数

「eps_fvm」処理：メッシュ読み込み（1/5）

```
!C
!C-- NODE
      read (IUNIT, '(10i10)') NODE_tot

      if (NODE_tot.ne.NX*NY*NZ) then
        write (*,'(a)') "incosistent test.grid and test.mesh !!!"
        call hpcmw_eps_fvm_abort
      endif

      allocate (NODE_VOL(NODE_tot), NODE_COND(NODE_tot),                &
     &          NODE_XYZ(3*NODE_tot))

      do i= 1, NODE_tot
        read (IUNIT,'(i10,5e16.6)') ii, NODE_VOL(i), NODE_COND(i),      &
     &                              (NODE_XYZ(3*i-3+k), k=1, 3)
      enddo
```

```
12  要素数:NODE_tot
 1      1.000000E+00    1.000000E+00    5.000000E-01    5.000000E-01    5.000000E-01
 2      1.000000E+00    1.000000E+00    1.500000E+00    5.000000E-01    5.000000E-01
 3      1.000000E+00    1.000000E+00    5.000000E-01    1.500000E+00    5.000000E-01
 4      1.000000E+00    1.000000E+00    1.500000E+00    1.500000E+00    5.000000E-01
 5      1.000000E+00    1.000000E+00    5.000000E-01    5.000000E-01    1.500000E+00
 6      1.000000E+00    1.000000E+00    1.500000E+00    5.000000E-01    1.500000E+00
 7      1.000000E+00    1.000000E+00    5.000000E-01    1.500000E+00    1.500000E+00
 8      1.000000E+00    1.000000E+00    1.500000E+00    1.500000E+00    1.500000E+00
 9      1.000000E+00    1.000000E+00    5.000000E-01    5.000000E-01    2.500000E+00
10      1.000000E+00    1.000000E+00    1.500000E+00    5.000000E-01    2.500000E+00
11      1.000000E+00    1.000000E+00    5.000000E-01    1.500000E+00    2.500000E+00
12      1.000000E+00    1.000000E+00    1.500000E+00    1.500000E+00    2.500000E+00
要素番号 要素体積        要素熱伝導率      要素中心X座標     要素中心Y座標     要素中心Z座標
         NODE_VOL(i)    NODE_COND(i)    NODE_XYZ(3*i-2) NODE_XYZ(3*i-1) NODE_XYZ(3*i)
```

「eps_fvm」処理：メッシュ読み込み（2/5）

コネクティビティ情報

```
!C
!C-- CONNECTION
      read (IUNIT,'(10i10)') CONN_tot
      allocate (CONN_NODE(2*CONN_tot), CONN_COEF(CONN_tot))
      do i= 1, CONN_tot
        read (IUNIT,'( 2i10, 3e16.6)') in1, in2, AREA, D1, D2
        CONN_NODE(2*i-1)= in1
        CONN_NODE(2*i  )= in2
        C1 = NODE_COND(in1)
        C2 = NODE_COND(in2)
        CONN_COEF(i)= AREA / ( D1/C1 + D2/C2 )
      enddo
```

CONN_tot:
総コネクティビティ数

```
20  コネクティビティ総数: CONN_tot
 1          2    1.000000E+00    5.000000E-01    5.000000E-01
 1          3    1.000000E+00    5.000000E-01    5.000000E-01
 1          5    1.000000E+00    5.000000E-01    5.000000E-01
 2          4    1.000000E+00    5.000000E-01    5.000000E-01
…
 6         10    1.000000E+00    5.000000E-01    5.000000E-01
 7          8    1.000000E+00    5.000000E-01    5.000000E-01
 7         11    1.000000E+00    5.000000E-01    5.000000E-01
 8         12    1.000000E+00    5.000000E-01    5.000000E-01
 9         10    1.000000E+00    5.000000E-01    5.000000E-01
 9         11    1.000000E+00    5.000000E-01    5.000000E-01
10         12    1.000000E+00    5.000000E-01    5.000000E-01
11         12    1.000000E+00    5.000000E-01    5.000000E-01
E1         E2    S:要素境界面積    d1:E1重心～      d2:E2重心～
                                     境界面距離       境界面距離
E1= CONN_NODE(2*ic-1)
E2= CONN_NODE(2*ic)
```

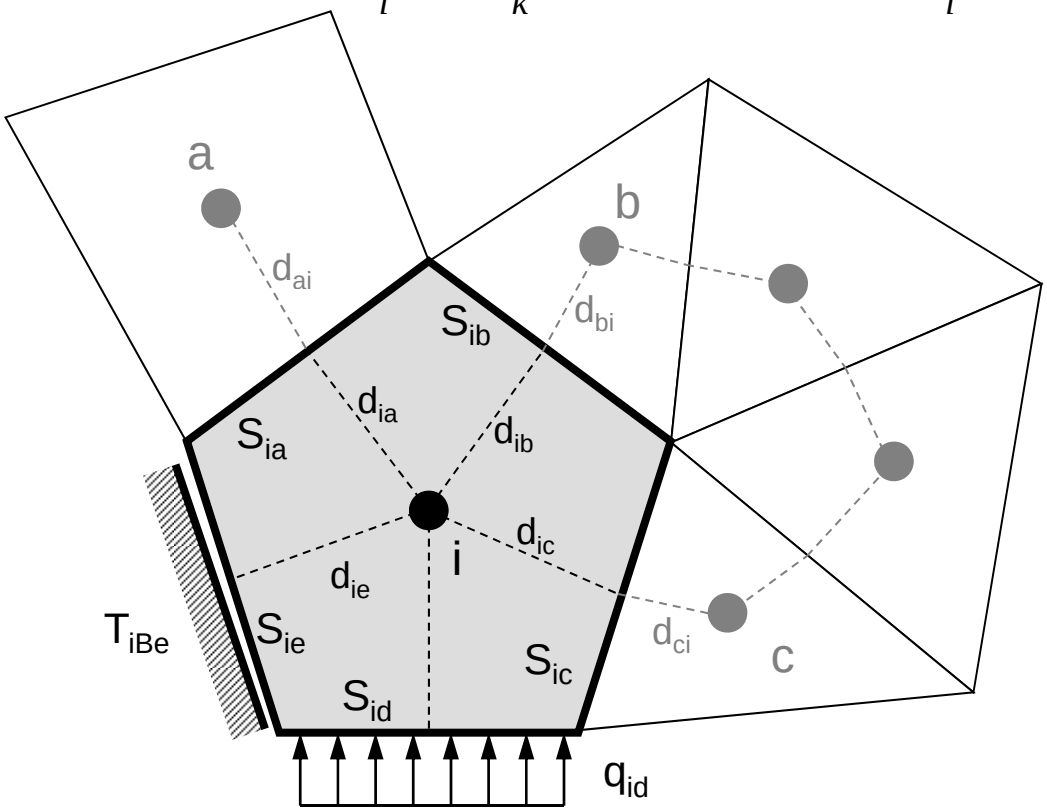
有限体積法による空間離散化

熱流束に関するつりあい式

隣接要素との熱伝導　　温度固定境界

$$\sum_k \frac{S_{ik}}{\frac{d_{ik}}{\lambda_i}+\frac{d_{ki}}{\lambda_k}}\left(T_k - T_i\right) + \sum_e \frac{S_{ie}}{\frac{d_{ie}}{\lambda_i}}\left(T_{iBe} - T_i\right) + \sum_d S_{id}\dot{q}_{id} + V_i\dot{Q}_i = 0$$

要素境界面通過熱流束　　体積発熱



λ　：熱伝導率

V_i　：要素体積

S　：表面面積

d_{ij}　：要素中心から表面までの距離

q　：表面フラックス

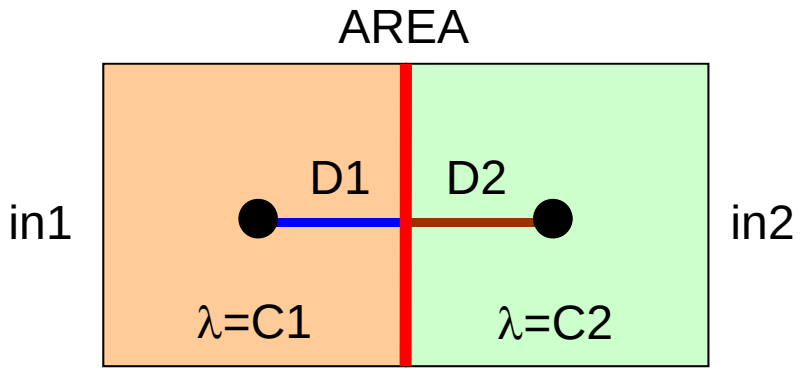
Q　：体積発熱

T_{iB}　：境界温度

「eps_fvm」処理：メッシュ読み込み（2/5）

コネクティビティ情報

```
!C
!C-- CONNECTION
      read (IUNIT,'(10i10)') CONN_tot
      allocate (CONN_NODE(2*CONN_tot), CONN_COEF(CONN_tot))
      do i= 1, CONN_tot
        read (IUNIT,'( 2i10, 3e16.6)') in1, in2, AREA, D1, D2
        CONN_NODE(2*i-1)= in1
        CONN_NODE(2*i  )= in2
        C1 = NODE_COND(in1)
        C2 = NODE_COND(in2)
        CONN_COEF(i)= AREA / ( D1/C1 + D2/C2 )
      enddo
```

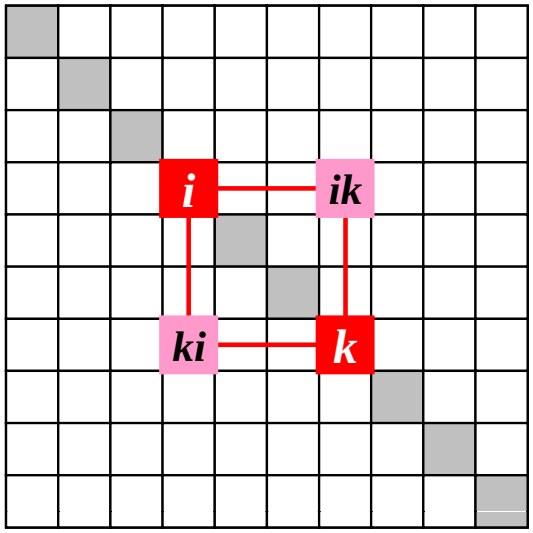


$$\sum_k \boxed{\frac{S_{ik}}{\frac{d_{ik}}{\lambda_i}+\frac{d_{ki}}{\lambda_k}}}\left(T_k - T_i\right) + \sum_e \frac{S_{ie}}{\frac{d_{ie}}{\lambda_i}}\left(T_{iBe} - T_i\right) + \sum_d S_{id}\dot{q}_{id} + V_i\dot{Q}_i = 0$$

CONN_COEF

CONN tot：
総コネクティビティ数
（これを2倍すると非対角成分総数）

非対角成分の計算を実施している

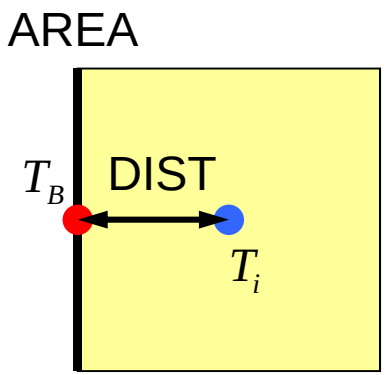


係数行列の非対角成分

「eps_fvm」処理：メッシュ読み込み（3/5）

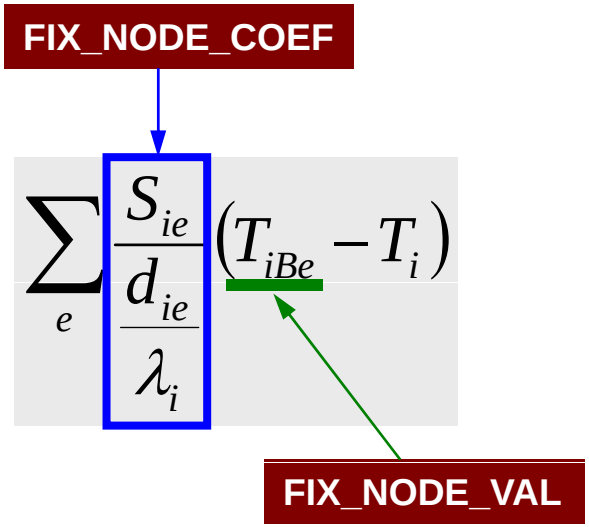
ディリクレ境界条件

```
!C
!C-- DIRICHLET
      read (IUNIT,'(10i10)') FIX_NODE_tot
      allocate (FIX_NODE_ID(FIX_NODE_tot), FIX_NODE_COEF(FIX_NODE_tot))
      allocate (FIX_NODE_VAL(FIX_NODE_tot))

      do i= 1, FIX_NODE_tot
        read (IUNIT, '(i10, 3e16.6)')                                  &
     &        FIX_NODE_ID(i), AREA, DIST, FIX_NODE_VAL(i): Tk
        icel= FIX_NODE_ID(i)
        COND= NODE_COND(icel)
        FIX_NODE_COEF(i)= AREA / (DIST/COND)
      enddo
```




```
 6   ディリクレ境界条件を与える要素数: FIX_NODE_tot
 2       1.000000E+00     5.000000E-01     0.000000E+00
 4       1.000000E+00     5.000000E-01     0.000000E+00
 6       1.000000E+00     5.000000E-01     0.000000E+00
 8       1.000000E+00     5.000000E-01     0.000000E+00
10       1.000000E+00     5.000000E-01     0.000000E+00
12       1.000000E+00     5.000000E-01     0.000000E+00
要素番号   境界面面積S       境界面と要素重心距離d   境界値TB
FIX_NODE_ID(ib)                            FIX_NODE_VAL(ib)
```

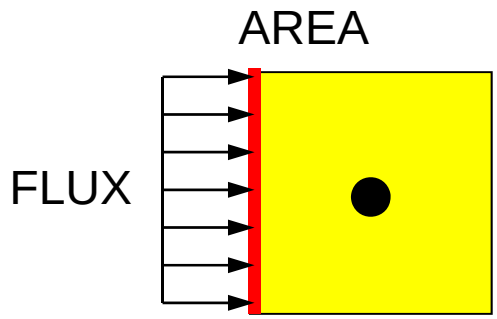
$$\sum_k \frac{S_{ik}}{\frac{d_{ik}}{\lambda_i}+\frac{d_{ki}}{\lambda_k}}\left(T_k - T_i\right) + \boxed{\sum_e \frac{S_{ie}}{\frac{d_{ie}}{\lambda_i}}\left(T_{iBe} - T_i\right)} + \sum_d S_{id}\dot{q}_{id} + V_i\dot{Q}_i = 0$$



「eps_fvm」処理：メッシュ読み込み（4/5）
ノイマン境界条件

```
!C
!C-- NEUMANN
      read (IUNIT,'(10i10)') SURF_NODE_tot
      allocate                                                          &
     &  (SURF_NODE_ID  (SURF_NODE_tot), SURF_NODE_FLUX(SURF_NODE_tot))

      do i= 1, SURF_NODE_tot
        read (IUNIT, '(i10, 3e16.6)') SURF_NODE_ID(i), AREA, FLUX
        SURF_NODE_FLUX(i)= AREA*FLUX
      enddo
```

```
 6   ノイマン境界条件を与える要素数: SURF_NODE_tot
 1       1.000000E+00     1.000000E+00
 3       1.000000E+00     1.000000E+00
 5       1.000000E+00     1.000000E+00
 7       1.000000E+00     1.000000E+00
 9       1.000000E+00     1.000000E+00
11       1.000000E+00     1.000000E+00
要素番号   境界表面積S       表面フラックスQS
SURF_NODE_ID(ib)
```



$$\sum_k \frac{S_{ik}}{\frac{d_{ik}}{\lambda_i}+\frac{d_{ki}}{\lambda_k}}\left(T_k - T_i\right) + \sum_e \frac{S_{ie}}{\frac{d_{ie}}{\lambda_i}}\left(T_{iBe} - T_i\right) + \sum_d \boxed{S_{id}\dot{q}_{id}} + V_i\dot{Q}_i = 0$$

SURF_NODE_FLUX

「eps_fvm」処理：メッシュ読み込み（5/5）

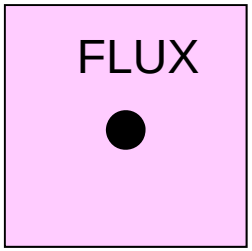
体積発熱

```
!C
!C-- BODY FLUX
      read (IUNIT,'(10i10)') BODY_NODE_tot

      allocate (BODY_NODE_FLUX(NODE_tot))
      do i= 1, BODY_NODE_tot
        read (IUNIT, '(i10, 3e16.6)') icel, FLUX
        BODY_NODE_FLUX(icel)= FLUX * NODE_VOL(icel)
      enddo
```

```
 4   体積発熱を与える要素数
 5       1.000000E+00
 6       1.000000E+00
 7       1.000000E+00
 8       1.000000E+00
要素番号   体積フラックスQV
```

$$\sum_k \frac{S_{ik}}{\frac{d_{ik}}{\lambda_i}+\frac{d_{ki}}{\lambda_k}}\left(T_k - T_i\right) + \sum_e \frac{S_{ie}}{\frac{d_{ie}}{\lambda_i}}\left(T_{iBe} - T_i\right) + \sum_d S_{id}\dot{q}_{id} + \boxed{V_i \dot{Q}_i} = 0$$

BODY_NODE_FLUX



```
program eps_fvm
use eps_fvm_all

implicit REAL*8 (A-H,O-Z)

call eps_fvm_input_grid          メッシュ読み込み(#S-GRID)
call poi_gen                     マトリクス生成
call eps_fvm_solver              線形ソルバー
call output_ucd                  AVS用結果ファイル書き出し(S-GRID-R-UCD)

end program eps_fvm
```

マトリクス関連変数表（eps_fvm_pcg）

変数名	型	サイズ	内容
NPLU	I	-	連立一次方程式係数マトリクス非対角成分総数
D(:)	R	NODE_tot	連立一次方程式係数マトリクス対角成分
PHI(:)	R	NODE_tot	連立一次方程式未知数ベクトル
BFORCE(:)	R	NODE_tot	連立一次方程式右辺ベクトル
index(:)	**I**	**0:NODE_tot**	**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)

```
D     (i)  対角成分(実数，i=1,N)
index(i)   非対角成分数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
```

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)

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

Compressed Row Storage (CRS)

	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

```
NODE_tot= 8
```

対角成分

```
D(1)=  1.1
D(2)=  3.6
D(3)=  5.7
D(4)=  9.8
D(5)= 11.5
D(6)= 12.4
D(7)= 23.1
D(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)

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

NPLU= 25 (=index(N))

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

NPLU= 25
(=index(N))

index(i-1)+1~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)    非対角成分数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
```

「eps_fvm」処理：マトリクス生成（1/5）

```
!C
!C***
!C*** POI_GEN
!C***
!C
!C    generate COEF. MATRIX for POISSON equations
!C
      subroutine POI_GEN

      use eps_fvm_all
      implicit REAL*8 (A-H,O-Z)
      integer, pointer :: IWKX(:,:)
!C
!C +-------+
!C | INIT. |
!C +-------+
!C===

!C
!C-- MATRIX
      nn = NODE_tot

      allocate (BFORCE(nn), D(nn), PHI(nn))
      allocate (index(0:nn))

      BFORCE= 0.d0
         PHI= 0.d0
           D= 0.d0

      index= 0
```

「eps_fvm」処理：マトリクス生成（2/5）

```
!C
!C-- ETC.
      allocate (IWKX(NODE_tot,6))
      IWKX= 0

      do ic= 1, CONN_tot
        in1= CONN_NODE(2*ic-1)
        in2= CONN_NODE(2*ic   )

        ik1= index(in1) + 1
        IWKX (in1,ik1)= ic
        index(in1    )= ik1

        ik2= index(in2) + 1
        IWKX (in2,ik2)= ic
        index(in2    )= ik2
      enddo

      do i= 1, nn
        index(i)= index(i-1) + index(i)
      enddo

      NPLU= index(nn)

      allocate (item(NPLU), AMAT(NPLU))
```

（非零）非対角成分数算出
（非零）非対角成分抽出

index(in)：
各要素の非対角成分数
（通し番号）

IWKX(in,1-6)：
各要素の非対角成分の
コネクティビティID
（CONN_NODE）

非対角要素数を増やした場合は
IWKXのサイズを増やせばよい
（現在は隣接要素数が6までに限定されている）

「eps_fvm」処理：マトリクス生成（2/5）

```
!C
!C-- ETC.
      allocate (IWKX(NODE_tot,6))
      IWKX= 0

      do ic= 1, CONN_tot
        in1= CONN_NODE(2*ic-1)
        in2= CONN_NODE(2*ic   )

        ik1= index(in1) + 1
        IWKX (in1,ik1)= ic
        index(in1    )= ik1

        ik2= index(in2) + 1
        IWKX (in2,ik2)= ic
        index(in2    )= ik2
      enddo

      do i= 1, nn
        index(i)= index(i-1) + index(i)
      enddo

      NPLU= index(nn)

      allocate (item(NPLU), AMAT(NPLU))
```

index(in)：
各要素の非対角成分数
（通し番号）

NPLU：
（非零）非対角成分の総数

「eps_fvm」処理：マトリクス生成（3/5）

```
      do i= 1, NODE_tot
        do j= 1, index(i)-index(i-1)
          k= index(i-1) + j

          ic = IWKX(i,j)
          in1= CONN_NODE(2*ic-1)
          in2= CONN_NODE(2*ic  )

          if (in1.eq.i) then
            item(k)= in2
           else
            item(k)= in1
          endif
        enddo
      enddo
!C===

!C
!C +----------------------------+
!C | INTERIOR NODEs + BODY FLUX |
!C +----------------------------+
!C===
      do icel= 1, NODE_tot
        BFORCE(icel)= BFORCE(icel) + BODY_NODE_FLUX(icel)
      enddo

      do i= 1, NODE_tot
        do j= index(i-1)+1, index(i)
          icon= IWKX(i,j-index(i-1))
          AMAT(j)= -CONN_COEF(icon)
          D   (i)= D(i) + CONN_COEF(icon)
        enddo
      enddo
      deallocate (IWKX)
!C===
```

index(in)：
各要素の非対角成分数（通し番号）

IWKX(in,1-6)：
各要素の非対角成分のコネクティビティID（CONN_NODE）

item(k)：
非対角成分（列番号）

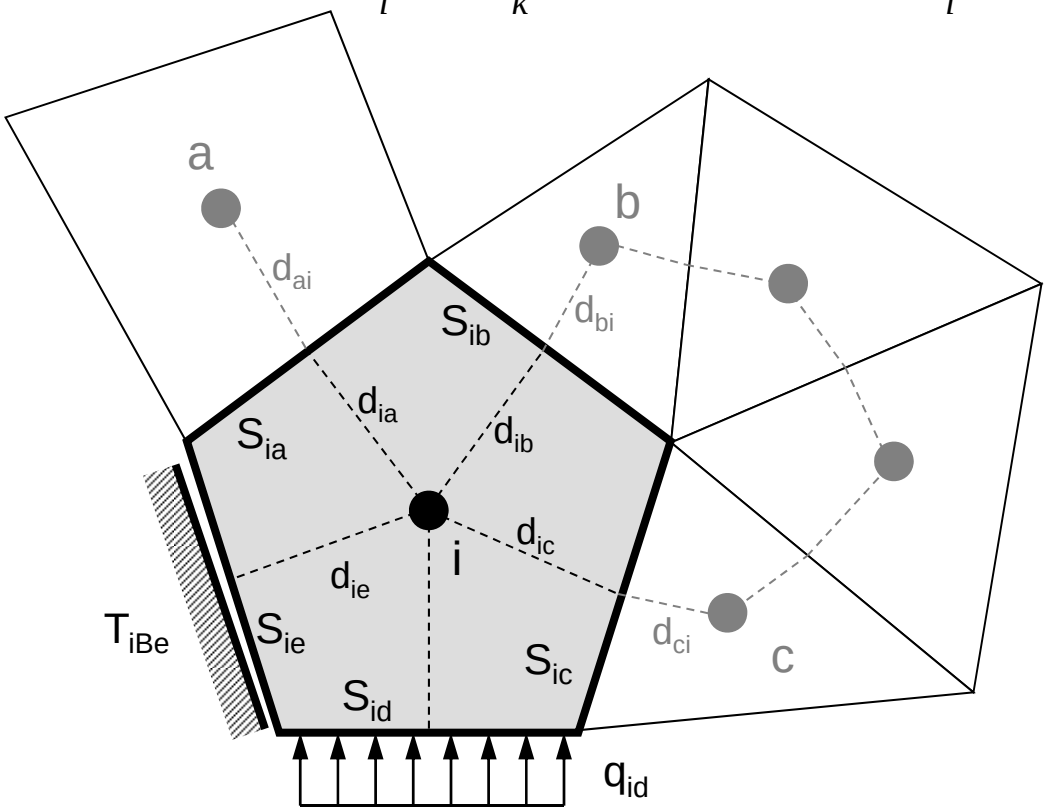
有限体積法による空間離散化

熱流束に関するつりあい式

隣接要素との熱伝導　　温度固定境界

$$\sum_k \frac{S_{ik}}{\frac{d_{ik}}{\lambda_i}+\frac{d_{ki}}{\lambda_k}}\left(T_k - T_i\right) + \sum_e \frac{S_{ie}}{\frac{d_{ie}}{\lambda_i}}\left(T_{iBe} - T_i\right) + \sum_d S_{id}\dot{q}_{id} + V_i\dot{Q}_i = 0$$

要素境界面通過熱流束　　体積発熱



λ　：熱伝導率
V_i　：要素体積
S　：表面面積
d_{ij}　：要素中心から表面までの距離
q　：表面フラックス
Q　：体積発熱
T_{iB}　：境界温度

全体マトリクスの生成

要素iに関する釣り合い

$$\sum_k \frac{S_{ik}}{\dfrac{d_{ik}}{\lambda_i}+\dfrac{d_{ki}}{\lambda_k}}\left(T_k - T_i\right) + \sum_e \frac{S_{ie}}{\dfrac{d_{ie}}{\lambda_i}}\left(T_{iBe} - T_i\right) + \sum_d S_{id}\dot{q}_{id} + V_i\dot{Q}_i = 0$$

隣接要素との熱伝導　温度固定境界　要素境界面通過熱流束　体積発熱

全体マトリクスの生成

要素iに関する釣り合い

$$-\sum_k \frac{S_{ik}}{\dfrac{d_{ik}}{\lambda_i}+\dfrac{d_{ki}}{\lambda_k}}\left(T_k - T_i\right) - \sum_e \frac{S_{ie}}{\dfrac{d_{ie}}{\lambda_i}}\left(T_{iBe} - T_i\right) - \sum_d S_{id}\dot{q}_{id} - V_i\dot{Q}_i = 0$$

隣接要素との熱伝導　温度固定境界　要素境界面通過熱流束　体積発熱

全体マトリクスの生成

要素iに関する釣り合い

$$-\sum_k \frac{S_{ik}}{\dfrac{d_{ik}}{\lambda_i}+\dfrac{d_{ki}}{\lambda_k}}\left(T_k - T_i\right) - \sum_e \frac{S_{ie}}{\dfrac{d_{ie}}{\lambda_i}}\left(T_{iBe} - T_i\right) - \sum_d S_{id}\dot{q}_{id} - V_i\dot{Q}_i = 0$$

$$-\sum_k \frac{S_{ik}}{\dfrac{d_{ik}}{\lambda_i}+\dfrac{d_{ki}}{\lambda_k}}T_k + \sum_k \frac{S_{ik}}{\dfrac{d_{ik}}{\lambda_i}+\dfrac{d_{ki}}{\lambda_k}}T_i - \underline{\sum_e \frac{S_{ie}}{\dfrac{d_{ie}}{\lambda_i}}T_{iBe}} + \sum_e \frac{S_{ie}}{\dfrac{d_{ie}}{\lambda_i}}T_i = \sum_d S_{id}\dot{q}_{id} + V_i\dot{Q}_i$$

定数項:右辺へ移項

全体マトリクスの生成

要素iに関する釣り合い

$$-\sum_k \frac{S_{ik}}{\frac{d_{ik}}{\lambda_i}+\frac{d_{ki}}{\lambda_k}}\left(T_k - T_i\right) - \sum_e \frac{S_{ie}}{\frac{d_{ie}}{\lambda_i}}\left(T_{iBe} - T_i\right) - \sum_d S_{id}\dot{q}_{id} - V_i\dot{Q}_i = 0$$

$$-\sum_k \frac{S_{ik}}{\frac{d_{ik}}{\lambda_i}+\frac{d_{ki}}{\lambda_k}}T_k + \sum_k \frac{S_{ik}}{\frac{d_{ik}}{\lambda_i}+\frac{d_{ki}}{\lambda_k}}T_i - \underline{\sum_e \frac{S_{ie}}{\frac{d_{ie}}{\lambda_i}}T_{iBe}} + \sum_e \frac{S_{ie}}{\frac{d_{ie}}{\lambda_i}}T_i = \sum_d S_{id}\dot{q}_{id} + V_i\dot{Q}_i$$

$$\left[\sum_k \frac{S_{ik}}{\frac{d_{ik}}{\lambda_i}+\frac{d_{ki}}{\lambda_k}} + \sum_e \frac{S_{ie}}{\frac{d_{ie}}{\lambda_i}}\right]T_i - \left[\sum_k \frac{S_{ik}}{\frac{d_{ik}}{\lambda_i}+\frac{d_{ki}}{\lambda_k}}T_k\right] = \sum_d S_{id}\dot{q}_{id} + V_i\dot{Q}_i + \sum_e \frac{S_{ie}}{\frac{d_{ie}}{\lambda_i}}T_{iBe}$$

D（対角成分） **AMAT（非対角成分）** **BFORCE（右辺）**

「eps_fvm」処理：マトリクス生成（3/5）

体積発熱

```
      do i= 1, NODE_tot
        do j= 1, index(i)-index(i-1)
          k= index(i-1) + j

          ic = IWKX(i,j)
          in1= CONN_NODE(2*ic-1)
          in2= CONN_NODE(2*ic   )

          if (in1.eq.i) then
            item(k)= in2
           else
            item(k)= in1
          endif
        enddo
      enddo!C===

!C
!C +----------------------------+
!C | INTERIOR NODEs + BODY FLUX |
!C +----------------------------+
!C===
      do icel= 1, NODE_tot
        BFORCE(icel)= BFORCE(icel) + BODY_NODE_FLUX(icel)
      enddo

      do i= 1, NODE_tot
        do j= index(i-1)+1, index(i)
          icon= IWKX(i,j-index(i-1))
          AMAT(j)= -CONN_COEF(icon)
          D   (i)= D(i) + CONN_COEF(icon)
        enddo
      enddo
      deallocate (IWKX)
!C===
```

$$\left[\sum_k \frac{S_{ik}}{\frac{d_{ik}}{\lambda_i}+\frac{d_{ki}}{\lambda_k}} + \sum_e \frac{S_{ie}}{\frac{d_{ie}}{\lambda_i}}\right] T_i - \left[\sum_k \frac{S_{ik}}{\frac{d_{ik}}{\lambda_i}+\frac{d_{ki}}{\lambda_k}} T_k\right]$$

$$= \sum_d S_{id}\dot{q}_{id} + \underline{V_i \dot{Q}_i} + \sum_e \frac{S_{ie}}{\frac{d_{ie}}{\lambda_i}} T_{iBe}$$

BFORCE（右辺）

BODY_NODE_FLUX

「eps_fvm」処理：マトリクス生成（3/5）

内部熱伝導

```
      do i= 1, NODE_tot
        do j= 1, index(i)-index(i-1)
          k= index(i-1) + j

          ic = IWKX(i,j)
          in1= CONN_NODE(2*ic-1)
          in2= CONN_NODE(2*ic  )

          if (in1.eq.i) then
            item(k)= in2
           else
            item(k)= in1
          endif
        enddo
      enddo!C===

!C
!C +----------------------------+
!C | INTERIOR NODEs + BODY FLUX |
!C +----------------------------+
!C===
      do icel= 1, NODE_tot
        BFORCE(icel)= BFORCE(icel) + BODY_NODE_FLUX(icel)
      enddo

      do i= 1, NODE_tot
        do j= index(i-1)+1, index(i)
          icon= IWKX(i,j-index(i-1))
          AMAT(j)= -CONN_COEF(icon)
          D   (i)= D(i) + CONN_COEF(icon)
        enddo
      enddo
      deallocate (IWKX)
!C===
```

D（対角成分）　AMAT（非対角成分）

$$\left[\sum_k \frac{S_{ik}}{\underbrace{\frac{d_{ik}}{\lambda_i}+\frac{d_{ki}}{\lambda_k}}_{\text{CONN\_COEF}}} + \sum_e \frac{S_{ie}}{\frac{d_{ie}}{\lambda_i}}\right] T_i - \left[\sum_k \frac{S_{ik}}{\underbrace{\frac{d_{ik}}{\lambda_i}+\frac{d_{ki}}{\lambda_k}}_{\text{CONN\_COEF}}} T_k\right]$$

$$= \sum_d S_{id}\dot{q}_{id} + V_i\dot{Q}_i + \sum_e \frac{S_{ie}}{\frac{d_{ie}}{\lambda_i}} T_{iBe}$$

「eps_fvm」処理：マトリクス生成（4/5）

ディリクレ境界条件（表面温度固定）

```
!C
!C +-----------+
!C | DIRICHLET |
!C +-----------+
!C===
      do i= 1, FIX_NODE_tot
        icel= FIX_NODE_ID(i)
        D     (icel)= D     (icel) + FIX_NODE_COEF(i)
        BFORCE(icel)= BFORCE(icel) + FIX_NODE_COEF(i)*FIX_NODE_VAL(i)
      enddo
!C===
```

D（対角成分）

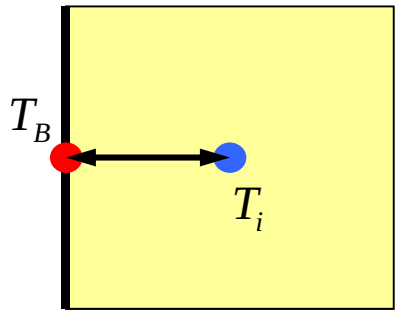
$$\left[\sum_k \frac{S_{ik}}{\frac{d_{ik}}{\lambda_i}+\frac{d_{ki}}{\lambda_k}} + \sum_e \frac{S_{ie}}{\frac{d_{ie}}{\lambda_i}}\right] T_i - \left[\sum_k \frac{S_{ik}}{\frac{d_{ik}}{\lambda_i}+\frac{d_{ki}}{\lambda_k}} T_k\right]$$

FIX_NODE_COEF

$$= \sum_d S_{id}\dot{q}_{id} + V_i\dot{Q}_i + \sum_e \frac{S_{ie}}{\frac{d_{ie}}{\lambda_i}} T_{iBe}$$

BFORCE（右辺）

FIX_NODE_COEF * FIX_NODE_VAL



「eps_fvm」処理：マトリクス生成（5/5）

ノイマン境界条件（表面熱流束）

```
!C
!C +--------------+
!C | SURFACE FLUX |
!C +--------------+
!C===
      do i= 1, SURF_NODE_tot
        icel= SURF_NODE_ID(i)
        BFORCE(icel)= BFORCE(icel) + SURF_NODE_FLUX(i)
      enddo
!C===
      return
      end
```

$$\left[\sum_k \frac{S_{ik}}{\frac{d_{ik}}{\lambda_i}+\frac{d_{ki}}{\lambda_k}}+\sum_e \frac{S_{ie}}{\frac{d_{ie}}{\lambda_i}}\right]T_i-\left[\sum_k \frac{S_{ik}}{\frac{d_{ik}}{\lambda_i}+\frac{d_{ki}}{\lambda_k}}T_k\right]$$

$$=\underbrace{\sum_d S_{id}\dot{q}_{id}}_{\text{SURF\_NODE\_FLUX}}+V_i\dot{Q}_i+\sum_e \frac{S_{ie}}{\frac{d_{ie}}{\lambda_i}}T_{iBe}$$

BFORCE（右辺）

```
program eps_fvm
use eps_fvm_all

implicit REAL*8 (A-H,O-Z)

call eps_fvm_input_grid          メッシュ読み込み(#S-GRID)
call poi_gen                     マトリクス生成
call eps_fvm_solver              線形ソルバー
call output_ucd                  AVS用結果ファイル書き出し(S-GRID-R-UCD)

end program eps_fvm
```

「eps_fvm」処理:ソルバー

```
      subroutine eps_fvm_solver

      use eps_fvm_all
      implicit REAL*8 (A-H,O-Z)

      EPS = 1.d-8
      ITR = NODE_tot

      call eps_fvm_solver_CG                                    &
     &    ( NODE_tot, NPLU, D, BFORCE, PHI, EPS,                 &
     &      ITR,  IER, index, item, AMAT, COMMtime)
      ISET= ISET + 1

      open (11, file='fvmmg.ctrl', status='unknown')
        read (11,*) NX, NY, NZ
      close (11)

      iS= NX*NY*NZ/2 + NX*NY/2
      do i= iS+1, iS+NX
        write (*,'(i8,3(1pe16.6))') i, PHI(i)
      enddo

      end subroutine eps_fvm_solver
```

科学技術計算における大規模線形方程式の解法

- 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。
  - important, expensive
- アプリケーションに応じて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）
  - グローバルな相互作用：BEM，スペクトル法，MO，MD（気液）
- 疎行列（sparse）
  - ローカルな相互作用：FEM，FDM，MD（固），高速多重極展開付BEM

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

- 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）

- 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

- 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。

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）向け
  - 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
  - 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，$p^{(i)}$：探索ベクトル，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。
  - 詳細は例えば：森正武「数値解析（第2版）」（共立出版）

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（DAXPY）

$x^{(i)}$ ：ベクトル

α_i ：スカラー

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ことになる。$[A']= [A][M]^{-1}$のように右から乗ずることもある
- 「前処理」は密行列，疎行列ともに使用するが，普通は疎行列を対象にすることが多い。

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
```

前処理付共役勾配法

Preconditioned Conjugate Gradient Method（PCG）

```
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 z(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
```

実際にやるべき計算は:

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

「近似逆行列」の計算が必要:

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

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＝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。

「eps_fvm」処理:ソルバー(1/7)

```
!C
!C***
!C*** CG
!C***
!C
      subroutine eps_fvm_solver_CG                                &
     &         ( N, NPLU, D, B, X, EPS, ITR, IER,                  &
     &           index, item, COEF)

      use eps_fvm_util
      implicit REAL*8 (A-H,O-Z)

      real(kind=kreal), dimension(N) :: D
      real(kind=kreal), dimension(N) :: B
      real(kind=kreal), dimension(N) :: X

      integer            , dimension(0:N) :: index
      integer            , dimension(NPLU):: item
      real   (kind=kreal), dimension(NPLU):: COEF

      real(kind=kreal) :: EPS

      integer :: ITR, IER
      integer :: P, Q, R, Z, DD

      real(kind=kreal), dimension(:,:), allocatable, save :: W
```

「eps_fvm」処理:ソルバー(2/7)

```
!C
!C +-------+
!C | INIT. |
!C +-------+
!C===
      if (.not.allocated(W)) then
        allocate (W(N,4))
      endif

      X= 0.d0
      W= 0.d0

      R = 1
      Z = 2
      Q = 2
      P = 3
      DD= 4

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

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>

「eps_fvm」処理：ソルバー（2/7）

```
!C
!C +-------+
!C | INIT. |
!C +-------+
!C===
      if (.not.allocated(W)) then
        allocate (W(NP,4))
      endif

      X= 0.d0
      W= 0.d0

      R = 1
      Z = 2
      Q = 2
      P = 3
      DD= 4

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

      IER  = 0
      Tcomm= 0.d0
!C===
```

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

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>

「eps_fvm」処理:ソルバー(3/7)

```
!C
!C +-----------------------+
!C | {r0}= {b} - [A]{xini} |
!C +-----------------------+
!C===
      do i= 1, N
        W(i,R) = D(i)*X(i)
        do j= index(i-1)+1, index(i)
          W(i,R) = W(i,R) + COEF(j) * X(item(j))
        enddo
      enddo

      BNRM2= 0.0D0
      do i= 1, N
        BNRM2= BNRM2 + B(i)  **2
        W(i,R)= B(i)  - W(i,R)
      enddo
!C===
```

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

「eps_fvm」処理:ソルバー(3/7)

```
!C
!C +-----------------------+
!C | {r0}= {b} - [A]{xini} |
!C +-----------------------+
!C===
      do i= 1, N
        W(i,R) = D(i)*X(i)
        do j= index(i-1)+1, index(i)
          W(i,R) = W(i,R) + COEF(j) * X(item(j))
        enddo
      enddo

      BNRM2= 0.0D0
      do i= 1, N
        BNRM2= BNRM2 + B(i)  **2
        W(i,R)= B(i)  - W(i,R)
      enddo
!C===
```

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]$z^{(i-1)}$= $r^{(i-1)}$
  ρ_{i-1}= $r^{(i-1)}$ $z^{(i-1)}$
  if i=1
    $p^{(1)}$= $z^{(0)}$
  else
    β_{i-1}= ρ_{i-1}/ρ_{i-2}
    $p^{(i)}$= $z^{(i-1)}$ + β_{i-1} $p^{(i-1)}$
  endif
  $q^{(i)}$= [A]$p^{(i)}$
  α_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

「eps_fvm」処理:ソルバー(4/7)

```
!C
!C*******************************  ITERATION
      do L= 1, ITR
!C
!C +----------------+
!C | {z}= [Minv]{r} |
!C +----------------+
!C===
      do i= 1, N
        W(i,Z)= W(i,DD) * W(i,R)
      enddo
!C===

!C
!C +-------------+
!C | RHO= {r}{z} |
!C +-------------+
!C===
      RHO= 0.d0
      do i= 1, N
        RHO= RHO + W(i,R)*W(i,Z)
      enddo
!C===
```

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>

「eps_fvm」処理:ソルバー(5/7)

```
!C
!C +-----------------------------+
!C | {p} = {z} if      ITER=1    |
!C | BETA= RHO / RHO1  otherwise |
!C +-----------------------------+
!C===
      if ( L.eq.1 ) then
        do i= 1, N
          W(i,P)= W(i,Z)
        enddo
       else
         BETA= RHO / RHO1
         do i= 1, N
           W(i,P)= W(i,Z) + BETA*W(i,P)
         enddo
      endif
!C===

!C
!C +-------------+
!C | {q}= [A]{p} |
!C +-------------+
!C===
      do i= 1, N
        W(i,Q) = D(i) * W(i,P)
        do j= index(i-1)+1, index(i)
          W(i,Q) = W(i,Q) + COEF(j) * W(item(j),P)
        enddo
      enddo
!C===
```

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>

「eps_fvm」処理:ソルバー(6/7)

```
!C
!C +----------------------+
!C | ALPHA= RHO / {p}{q} |
!C +----------------------+
!C===
      C1= 0.d0
      do i= 1, N
        C1= C1 + W(i,P)*W(i,Q)
      enddo
      ALPHA= RHO / C1
!C===

!C +-----------------------+
!C | {x}= {x} + ALPHA*{p} |
!C | {r}= {r} - ALPHA*{q} |
!C +-----------------------+
!C===
      do i= 1, N
        X(i)  = X(i)   + ALPHA * W(i,P)
        W(i,R)= W(i,R) - ALPHA * W(i,Q)
      enddo
```

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>

「eps_fvm」処理:ソルバー(7/7)

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

        RESID= dsqrt(DNRM2/BNRM2)

        if (my_rank.eq.0) write (*, 1000) L, RESID
 1000   format (i5, 1pe16.6)

        if ( RESID.le.EPS) goto 900
        RHO1 = RHO

      enddo
      IER = 1

  900 continue


      ITR= L
      EPS= RESID

      return


      end subroutine hpcmw_eps_fvm_solver_CG
```

r= b-[A]x
DNRM2=|r|²
BNRM2=|b|²

RESID= |r|/|b|

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>

いろいろなメッシュでやってみよう

- MicroAVSの使い方に慣れる。