有限要素法による
一次元定常熱伝導解析プログラム
Fortran編

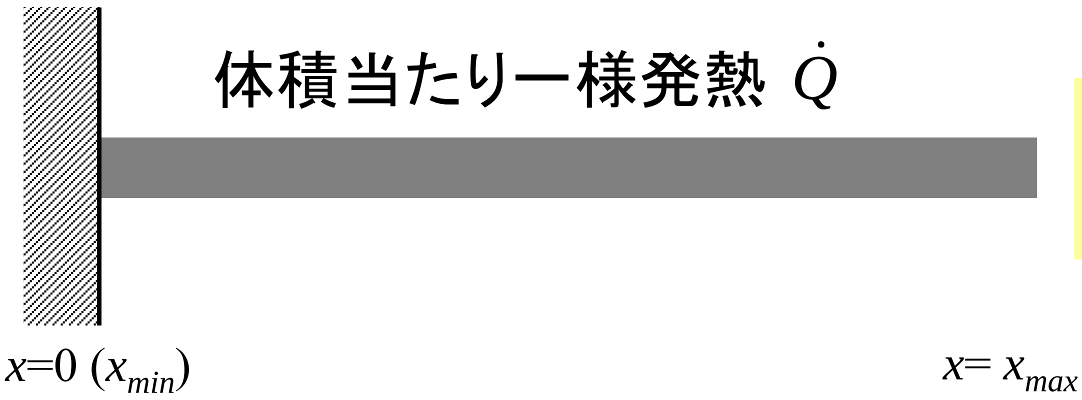
中島 研吾
東京大学情報基盤センター

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

キーワード

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

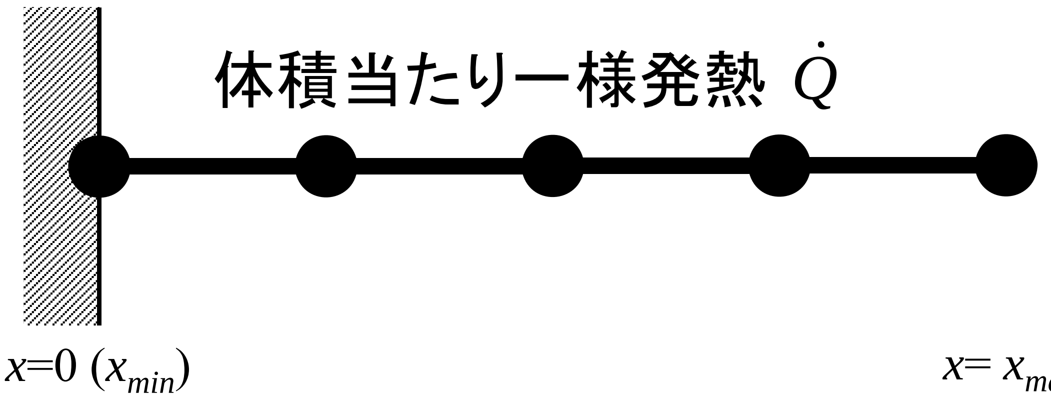
対象とする問題：一次元熱伝導問題



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

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

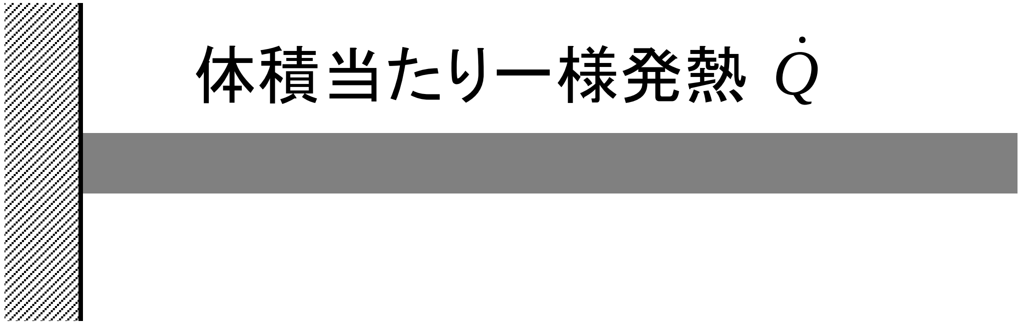
対象とする問題：一次元熱伝導問題



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

- 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



x=0 (x_{min})

x= x_{max}

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

$$T=0 @ x=0$$

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

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

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

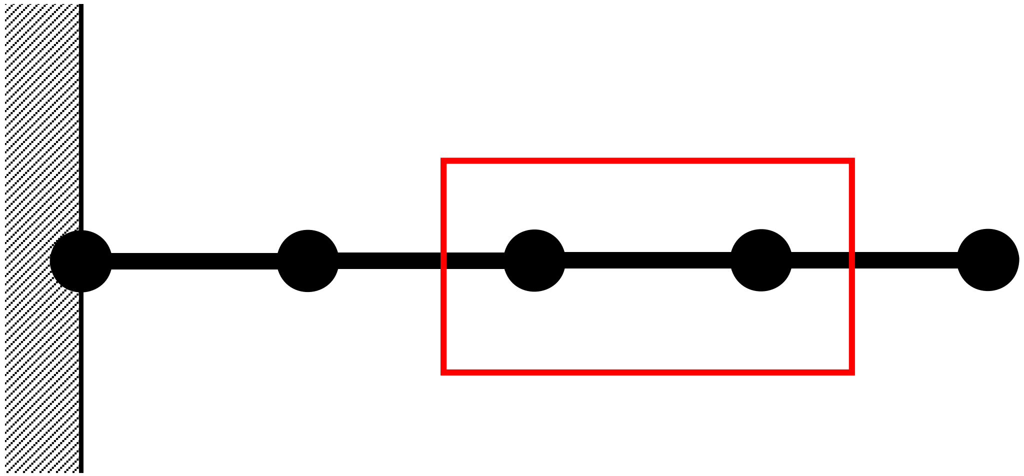
$$\lambda T=-\frac{1}{2}\dot{Q}x^2+C_1 x+C_2 \Rightarrow C_2=0, \quad T=0 @ x=0$$

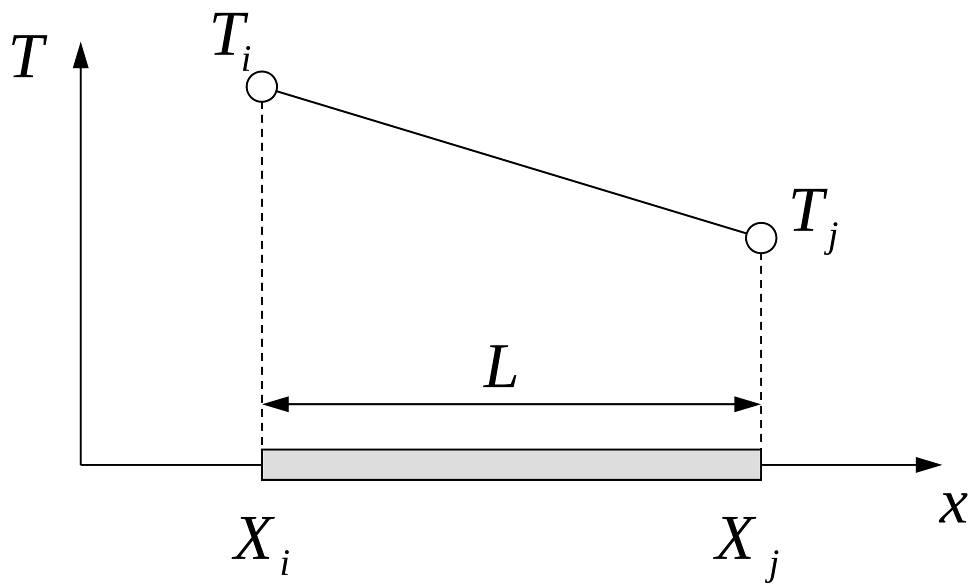
$$\therefore \quad T=-\frac{1}{2\lambda}\dot{Q}x^2+\frac{\dot{Q}x_{\max}}{\lambda}x$$

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）：

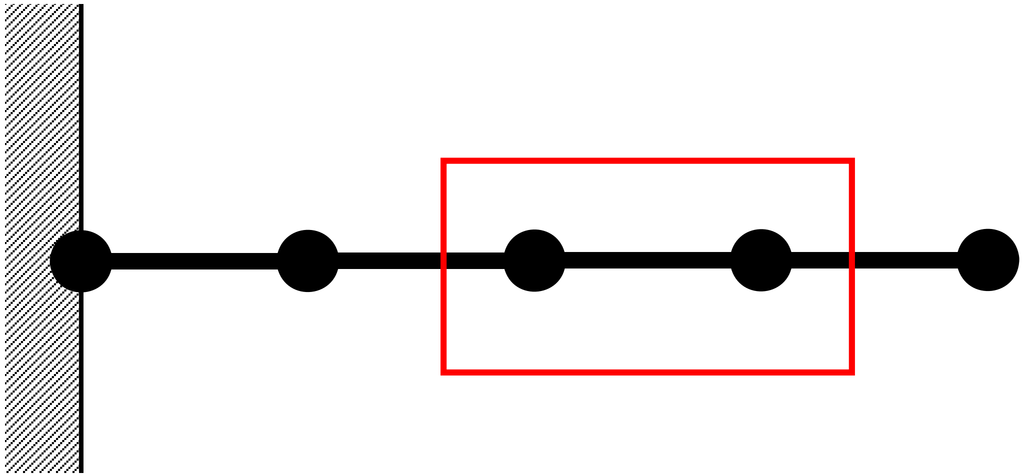
$$T = \alpha_1 + \alpha_2 x$$





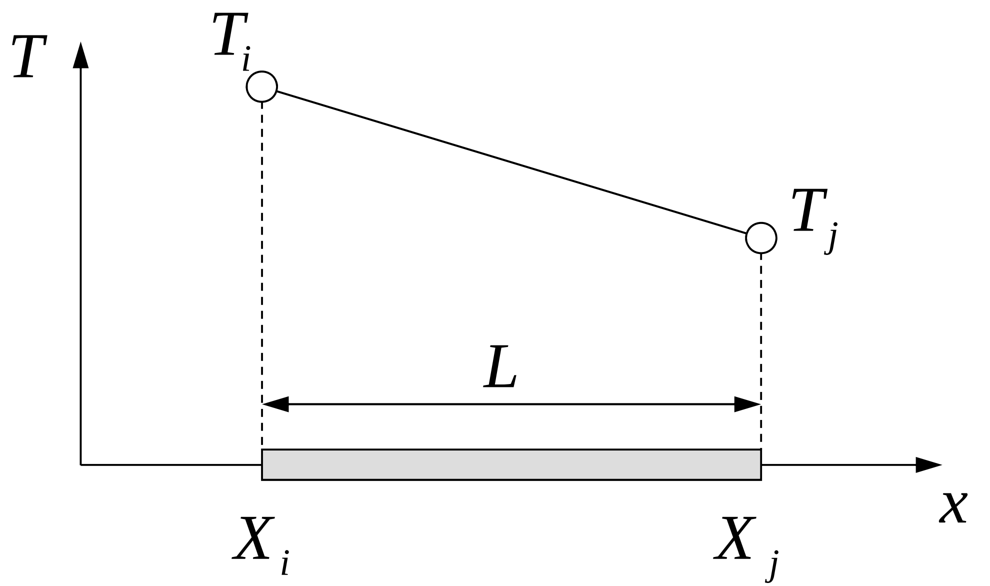
一次元線形要素（1/4）

- 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

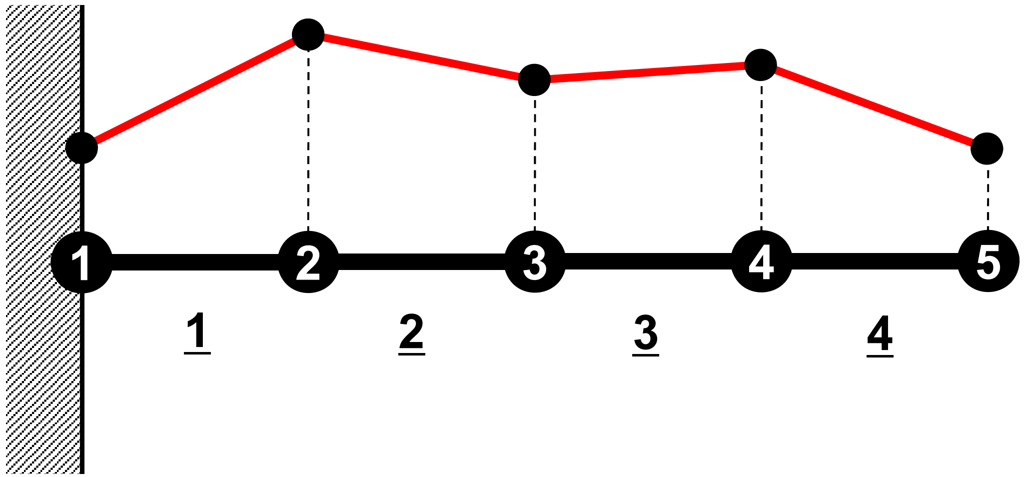


  - 節点 i,j における温度を ϕ_i, ϕ_j
  - 要素内での温度Tは以下のように表される（座標xの一次関数，Piecewise Linear）：

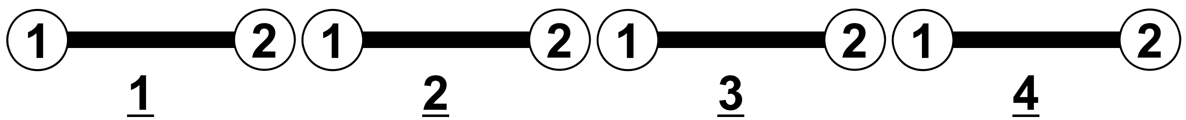
$$T=\alpha_1+\alpha_2 x$$



Piecewise Linear
各要素内で「温度Tの分布」が線形



要素番号
節点番号(全体)



各要素における
「局所」節点番号

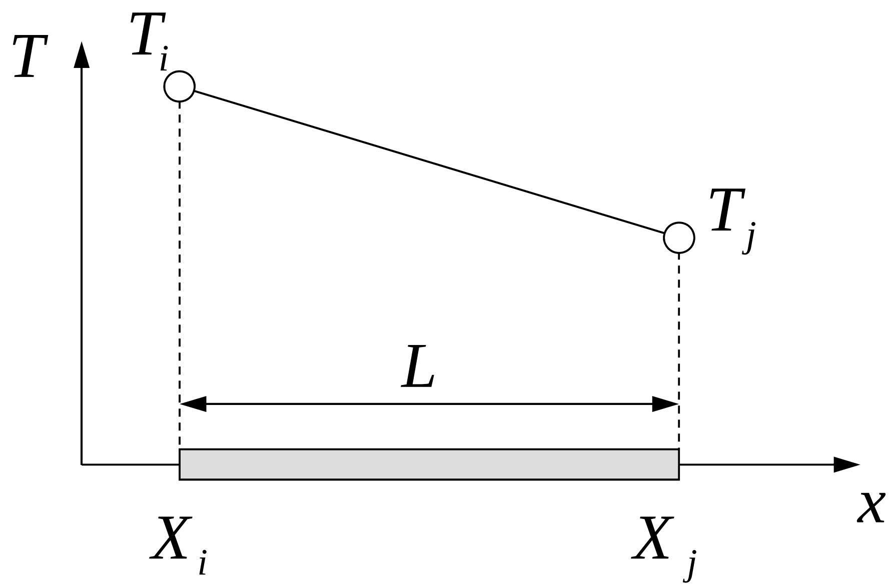
温度勾配は要素内で一定
(節点で不連続となる可能性あり)

一次元線形要素：形状関数（2/4）

- 節点での条件から，係数は以下のように求められる：

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

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



- 従って：

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

- 元の式に代入して，書き直すと以下のようになる

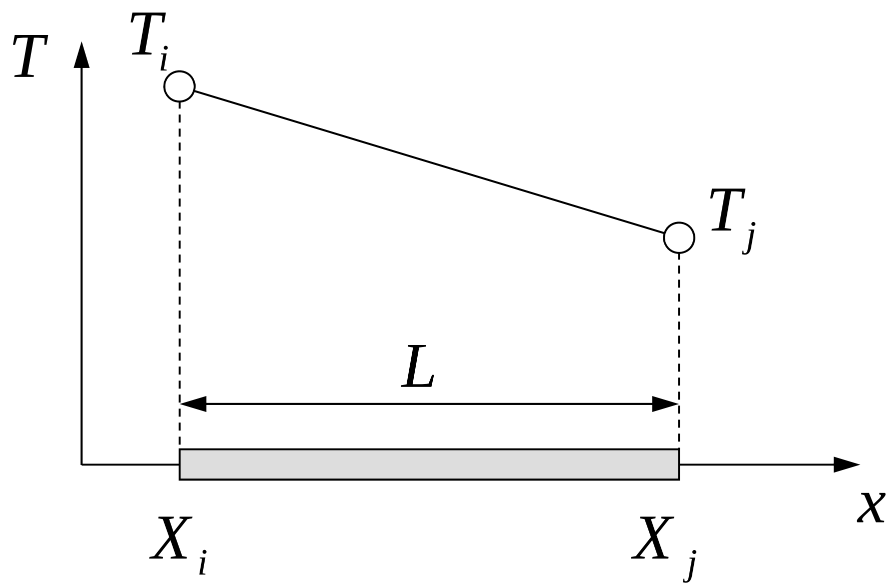
$$T = \underbrace{\boxed{\left(\frac{X_j - x}{L}\right)}}_{N_i} T_i + \underbrace{\boxed{\left(\frac{x - X_i}{L}\right)}}_{N_j} T_j$$

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

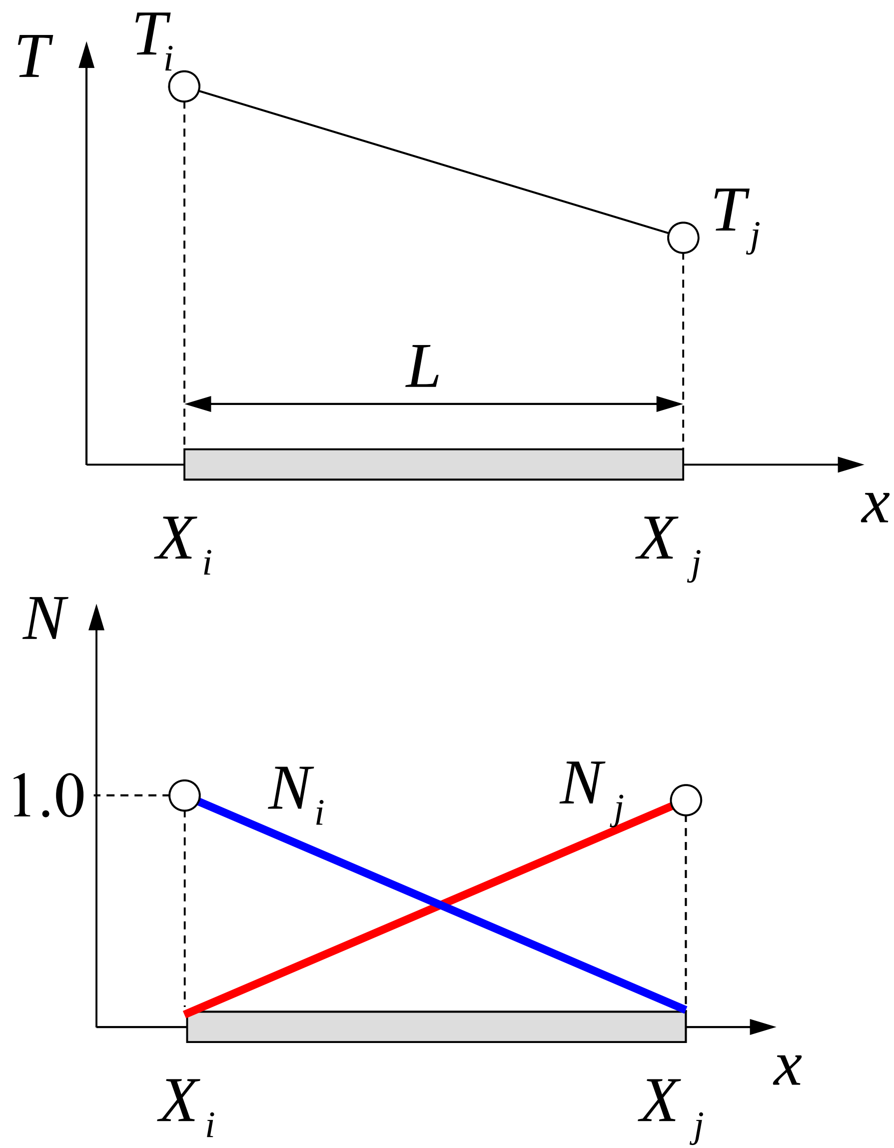
a_i　係数（未知数）

一次元線形要素：形状関数（4/4）

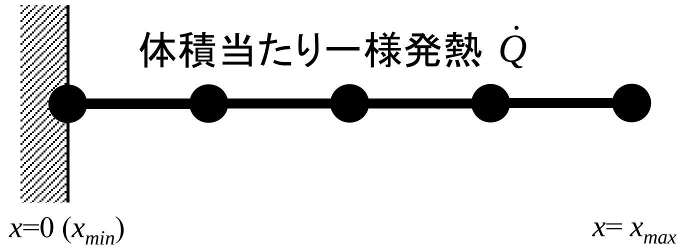
- 形状関数はある節点で1の値をとり，他の節点では必ず0の値をとる：

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

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）：

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

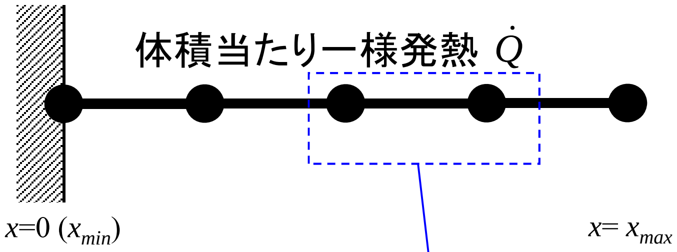
$$T=[N]\{\phi\}$$

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）



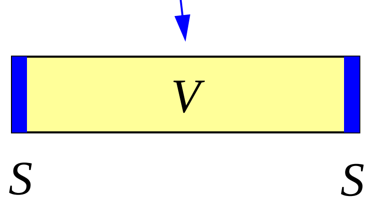
- 一次元のグリーンの定理

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

- 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：

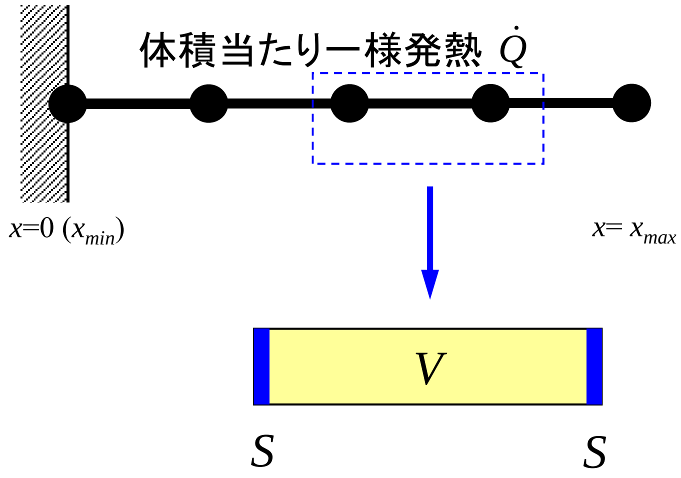


$$T = [N]\{\phi\}, \quad \frac{dT}{dx} = \frac{d[N]}{dx}\{\phi\} \qquad \bar{q} = -\lambda\frac{dT}{dx}$$

: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：

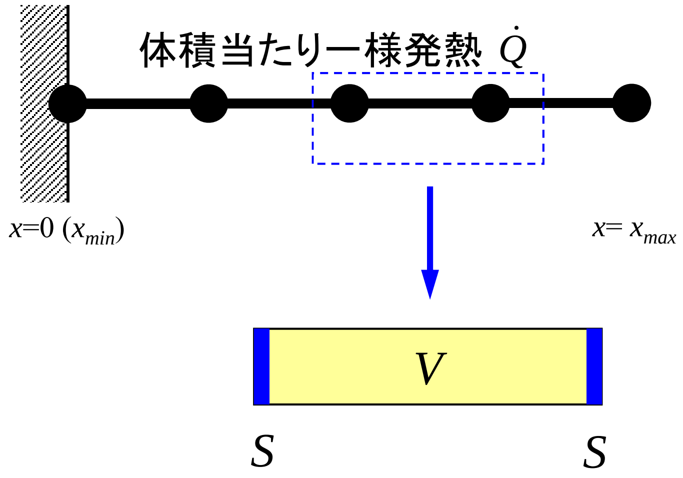


$$
-\int_V \lambda \left(\frac{d[N]^T}{dx} \frac{d[N]}{dx} \right) dV \cdot \{\phi\}
- \int_S \bar{q}[N]^T dS + \int_V \dot{Q}[N]^T dV = 0
$$

- 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）

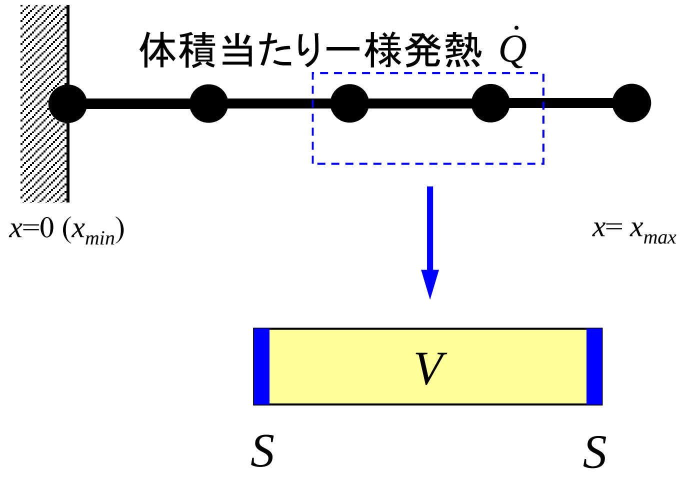
$$
-\int_V \lambda \left(\frac{d[N]^T}{dx} \frac{d[N]}{dx} \right) dV \cdot \{\phi\}
$$
$$
\boxed{-\int_S \bar{q}[N]^T dS} + \int_V \dot{Q}[N]^T dV = 0
$$



- 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



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

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

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

境界条件を考慮した弱形式：各要素

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

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

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

要素単位での積分：[k]

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

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

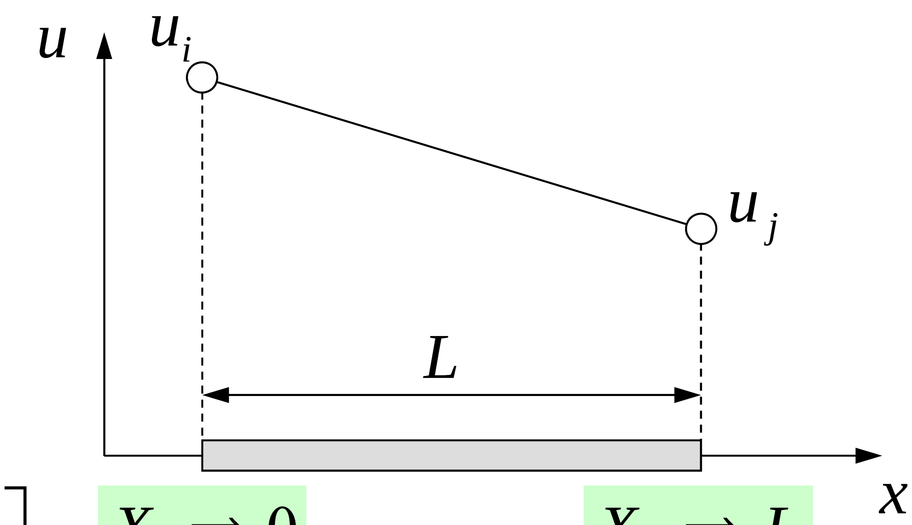
$$\int_V \lambda \left(\frac{d[N]^T}{dx} \frac{d[N]}{dx} \right) dV$$

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

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



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

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

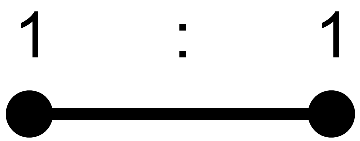
要素単位での積分： $\{f\}$ （1/2）

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

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

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

体積当たり発熱



A:断面積, L:要素長さ

要素単位での積分：{*f*}（2/2）

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

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

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

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

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

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

```
>$ cd <$CUR>

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

>$ cd fem-c or cd fem-f
```

以下のディレクトリが出来ていることを確認

```
      1D   fem3D
```

これらを以降 <$P-TOP>/1d，<$P-TOP>/fem3D

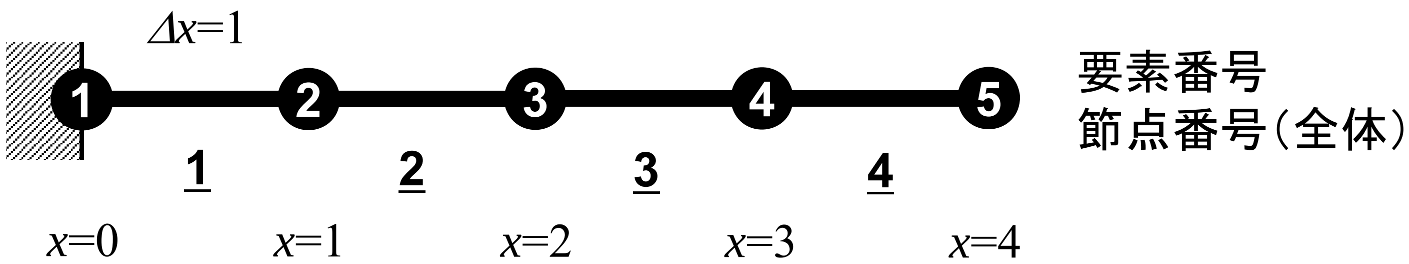
Your PC

FX10

実行（Cygwinではa.exe）

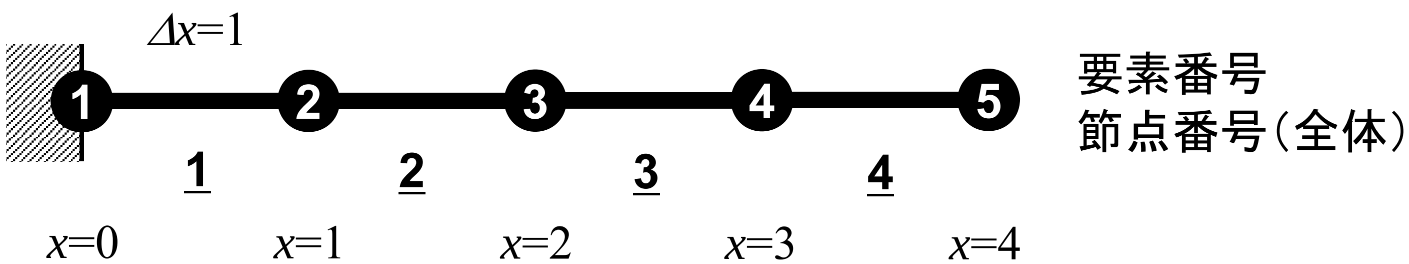
```
>$ cd <$P-TOP>/1d
>$ cc –O 1d.c      (or gfortran –O 1d.f)
>$ ./a.out
```

```
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
```



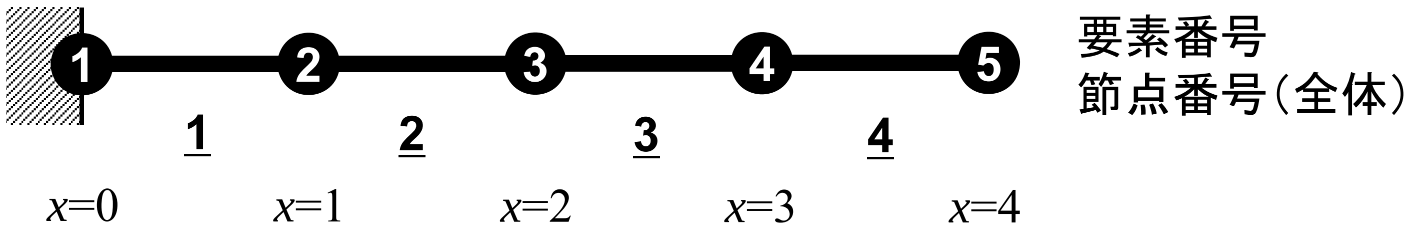
結果

```
>$ ./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：

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

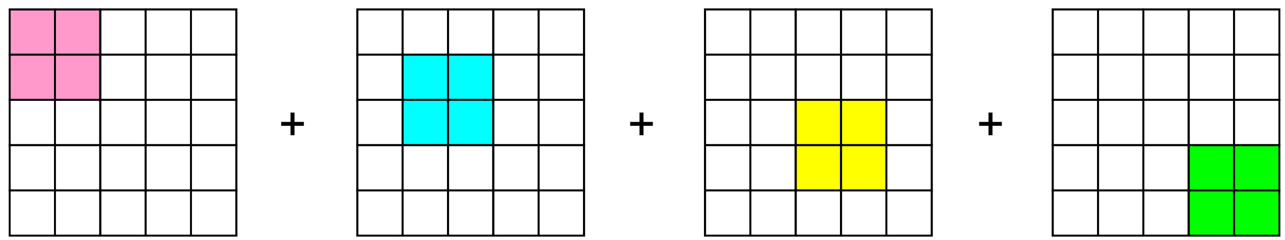
- 要素4については：

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

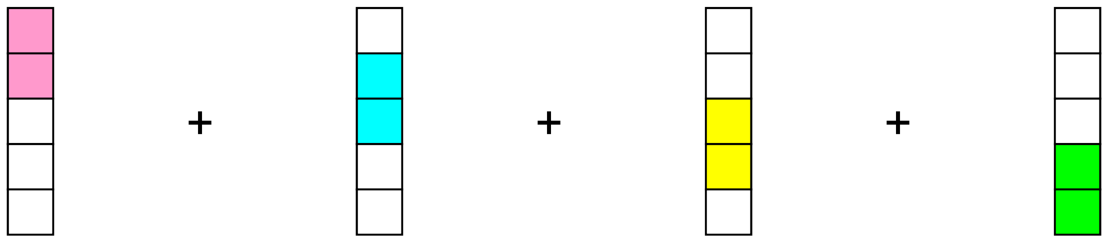
要素方程式とその重ね合わせ（2/3）

- これを順番に足していけばよい

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



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



要素方程式とその重ね合わせ（3/3）

- 差分との関係

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

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

$$= \begin{array}{|c|c|c|c|c|}\hline +1 & -1 & & & \\ \hline -1 & +2 & -1 & & \\ \hline & -1 & +2 & -1 & \\ \hline & & -1 & +2 & -1 \\ \hline & & & -1 & +1 \\ \hline \end{array} \times \frac{\lambda A}{L}$$

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

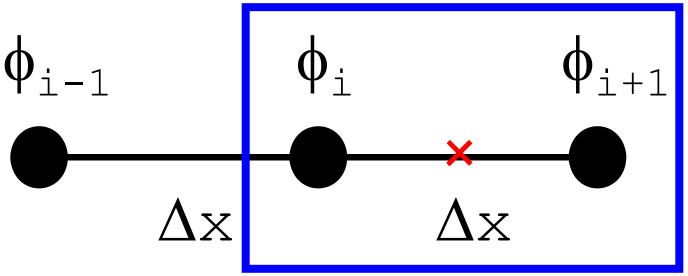
$$= -\left(\frac{T_{i+1}-2T_i+T_{i-1}}{L^2}\right)\cdot AL = -\left(T_{i+1}-2T_i+T_{i-1}\right)\cdot\frac{A}{L}$$

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

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

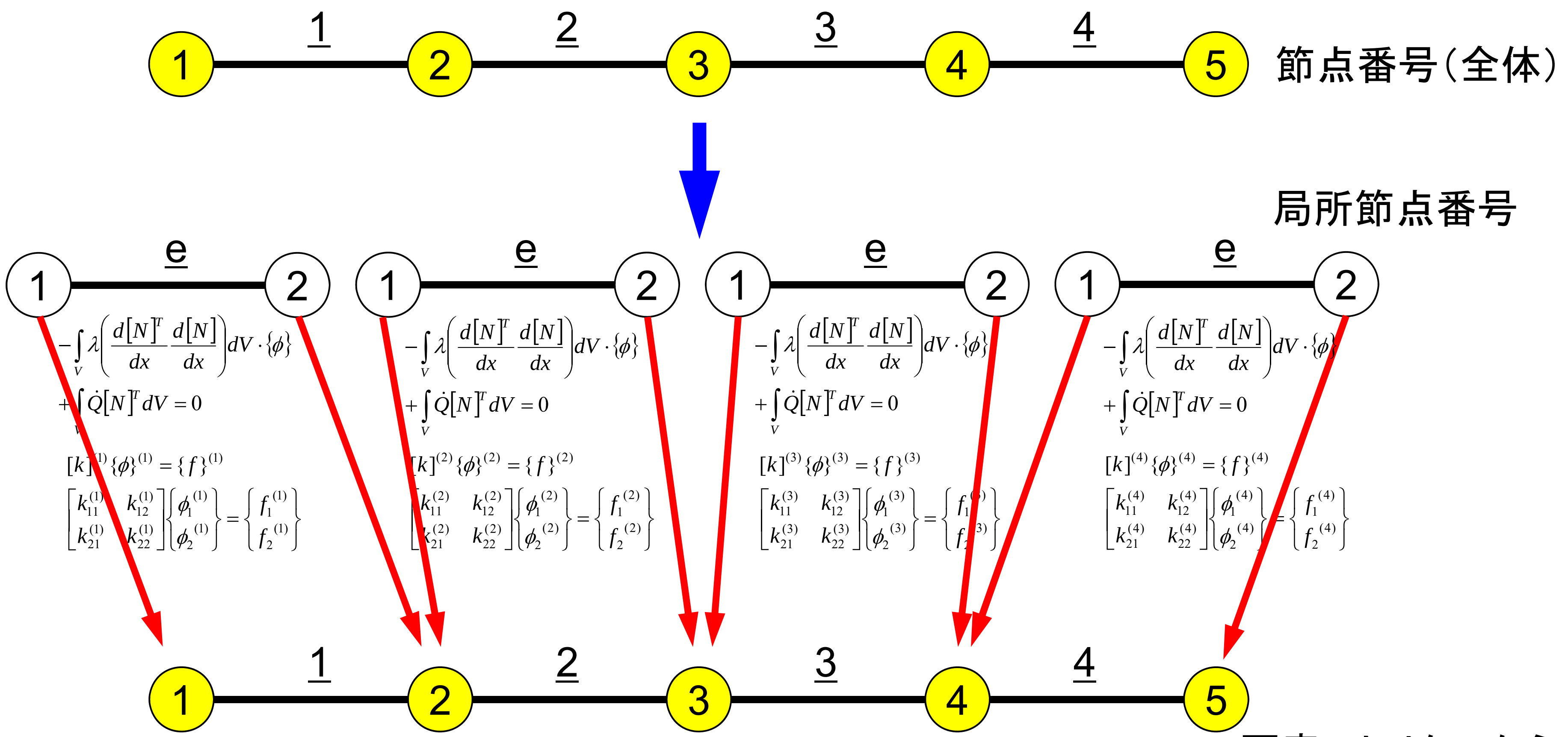
要素ごとに物性，寸法が異なっても簡単に対応が可能

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

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

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

要素処理と全体処理



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

$$[k]^{(1)}\{\phi\}^{(1)} = \{f\}^{(1)} \qquad \begin{bmatrix} k_{11}^{(1)} & k_{12}^{(1)} \\ k_{21}^{(1)} & k_{22}^{(1)} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \phi_1^{(1)} \\ \phi_2^{(1)} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} f_1^{(1)} \\ f_2^{(1)} \end{Bmatrix}$$

$$[k]^{(2)}\{\phi\}^{(2)} = \{f\}^{(2)} \qquad \begin{bmatrix} k_{11}^{(2)} & k_{12}^{(2)} \\ k_{21}^{(2)} & k_{22}^{(2)} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \phi_1^{(2)} \\ \phi_2^{(2)} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} f_1^{(2)} \\ f_2^{(2)} \end{Bmatrix}$$

$$[k]^{(3)}\{\phi\}^{(3)} = \{f\}^{(3)} \qquad \begin{bmatrix} k_{11}^{(3)} & k_{12}^{(3)} \\ k_{21}^{(3)} & k_{22}^{(3)} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \phi_1^{(3)} \\ \phi_2^{(3)} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} f_1^{(3)} \\ f_2^{(3)} \end{Bmatrix}$$

$$[k]^{(4)}\{\phi\}^{(4)} = \{f\}^{(4)} \qquad \begin{bmatrix} k_{11}^{(4)} & k_{12}^{(4)} \\ k_{21}^{(4)} & k_{22}^{(4)} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \phi_1^{(4)} \\ \phi_2^{(4)} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} f_1^{(4)} \\ f_2^{(4)} \end{Bmatrix}$$

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

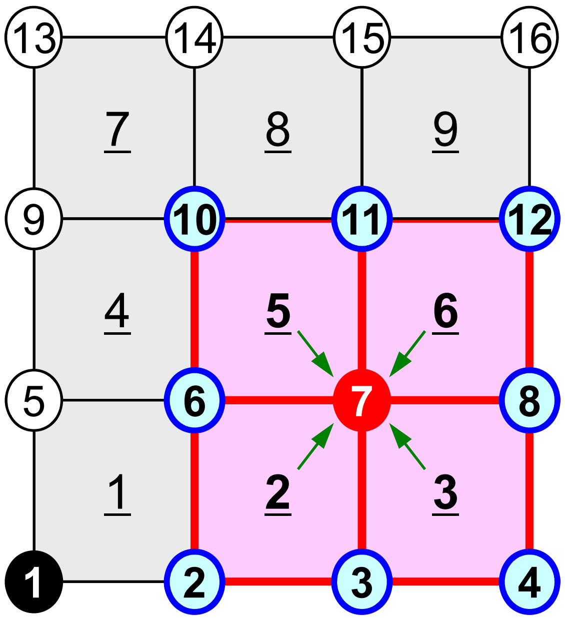
$$\begin{bmatrix} D_1 & AU_{11} & & & \\ AL_{21} & D_2 & AU_{21} & & \\ & AL_{31} & D_3 & AU_{31} & \\ & & AL_{41} & D_4 & AU_{41} \\ & & & AL_{51} & D_5 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \Phi_1 \\ \Phi_2 \\ \Phi_3 \\ \Phi_4 \\ \Phi_5 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} B_1 \\ B_2 \\ B_3 \\ B_4 \\ B_5 \end{Bmatrix}$$

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

- 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：

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

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

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

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

非定常反復法：クリロフ部分空間法（2/2）
Krylov Subspace Method

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

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

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

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

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
  - DAXPY (Double Precision: a{X} + {Y})

$x^{(i)}$:ベクトル

α_i :スカラー

共役勾配法のアルゴリズム

```
Compute r(0)= b-[A]x(0)
for i= 1, 2, …
    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 (Double Precision: a{X} + {Y})

$x^{(i)}$:ベクトル

α_i :スカラー

共役勾配法のアルゴリズム

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

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

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

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

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

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

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

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:

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

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

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

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. α(i-1)
    x(i)= x(i-1) + α(i-1)p(i-1)
    r(i)= r(i-1) - α(i-1)[A]p(i-1)

    check convergence |r|
    (if not converged)
    calc. β(i-1)
    p(i)= r(i) + β(i-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:

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

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:

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

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

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

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

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

$$\left(r^{(k+1)}, r^{(i)}\right) = \left(r^{(i)}, r^{(k+1)}\right) \overset{(2)}{=} \left(r^{(i)}, r^{(k)} - \alpha_k Ap^{(k)}\right)$$
$$\overset{(*)}{=} -\alpha_k \left(r^{(i)}, Ap^{(k)}\right) \overset{(4)}{=} -\alpha_k \left(p^{(i)} - \beta_{i-1} p^{(i-1)}, Ap^{(k)}\right)$$
$$= -\alpha_k \left(p^{(i)}, Ap^{(k)}\right) + \alpha_k \beta_{i-1} \left(p^{(i-1)}, Ap^{(k)}\right) \overset{(*)}{=} 0$$

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

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

(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

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

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

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

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

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

α_k, β_k

実際はα_k, β_kはもうちょっと簡単な形に変形できる:

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

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

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

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

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
```

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

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

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

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

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

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

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

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

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：$O(10^{16})$
    - 非零非対角成分数：$O(10^{10})$
- 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，i=1,N）
INDEX(i)	非対角成分数に関する一次元配列（整数，i=0,N）
ITEM(k)	非対角成分の要素（列）番号（整数，k=1, 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
```

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

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)

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

Compressed Row Storage (CRS)
Fortranの場合，Cでは0番から番号付け

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

N= 8

対角成分

```
Diag(1)=  1.1
Diag(2)=  3.6
Diag(3)=  5.7
Diag(4)=  9.8
Diag(5)= 11.5
Diag(6)= 12.4
Diag(7)= 23.1
Diag(8)= 51.3
```

Compressed Row Storage (CRS)

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

Compressed Row Storage (CRS)

						非対角成分数	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
```

Compressed Row Storage (CRS) : C

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.f（1/6）
諸変数

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

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

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

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

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

変数表（1/2）

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

変数表（2/2）

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

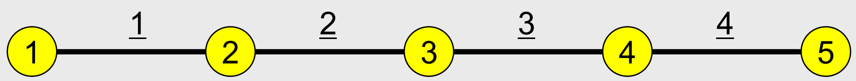
プログラム：1d.f(2/6)

初期設定，配列宣言

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

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

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

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）

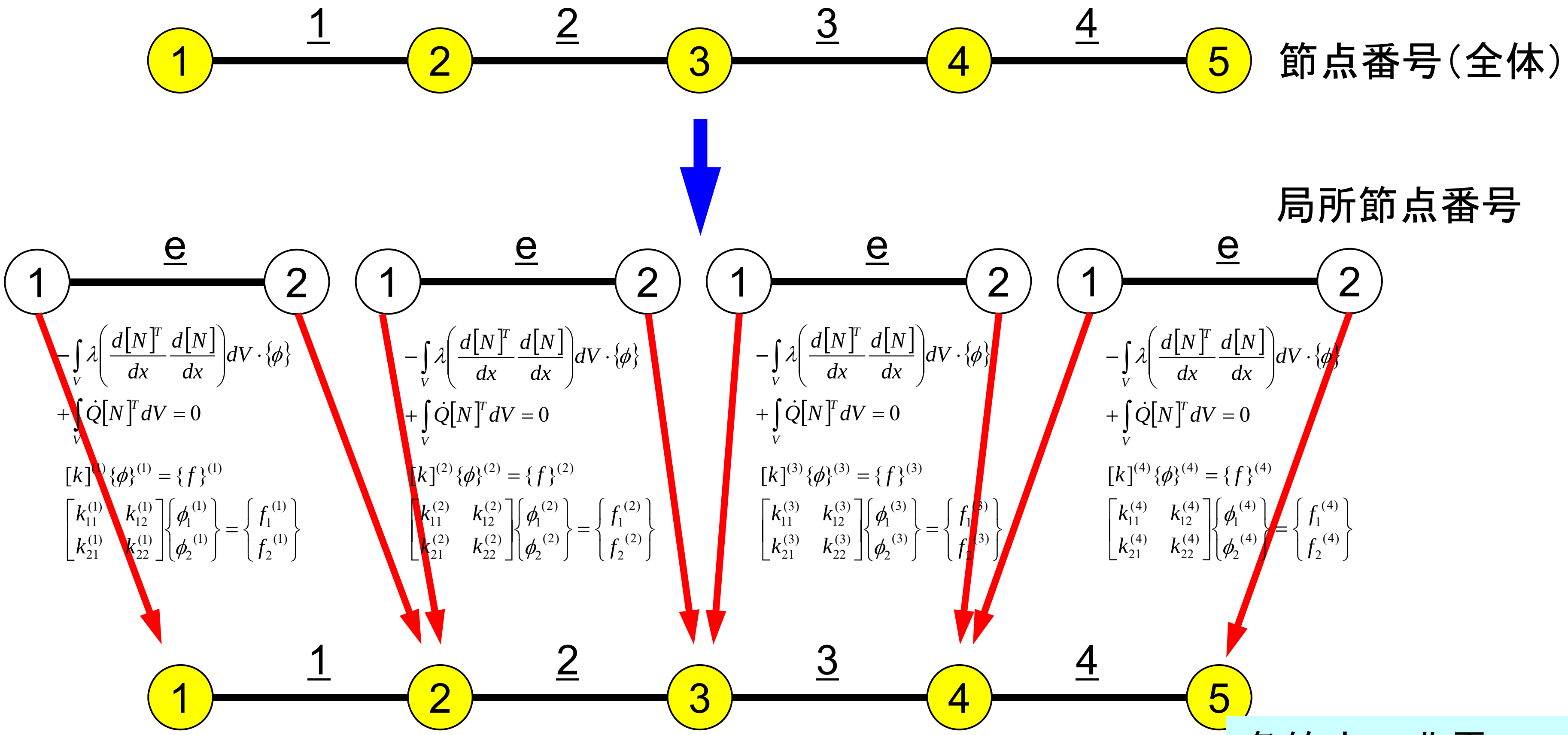
プログラム:1d.f(2/6)

初期設定，配列宣言

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


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

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

Amat：　非零非対角成分
Item：　対応する列番号

要素処理と全体処理



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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

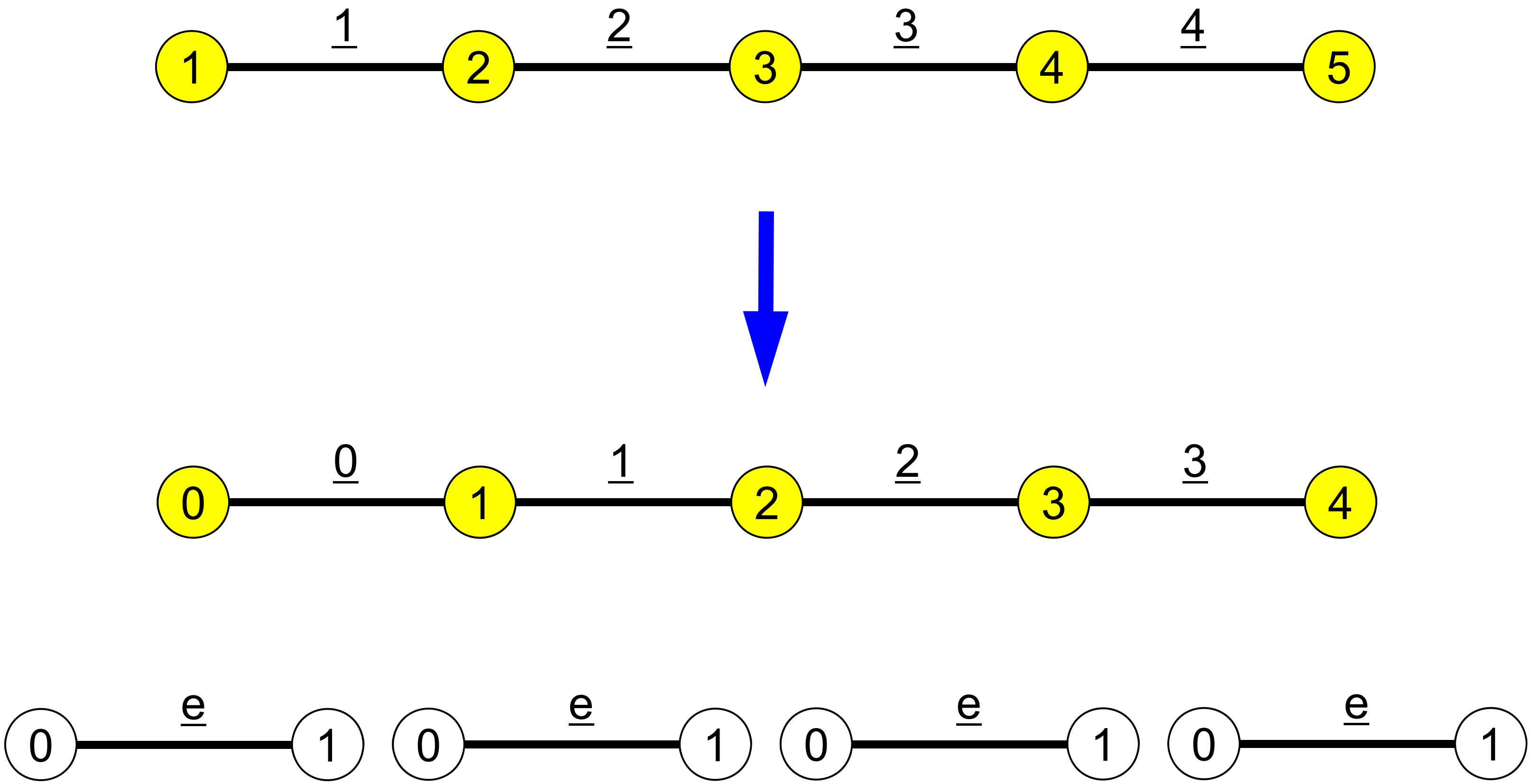
$$\begin{bmatrix} k_{11}^{(4)} & k_{12}^{(4)} \\ k_{21}^{(4)} & k_{22}^{(4)} \end{bmatrix}\begin{Bmatrix} \phi_1^{(4)} \\ \phi_2^{(4)} \end{Bmatrix}=\begin{Bmatrix} f_1^{(4)} \\ f_2^{(4)} \end{Bmatrix}$$

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

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

各節点の非零
非対角成分数
は「2」(ただし両端
では「1」)

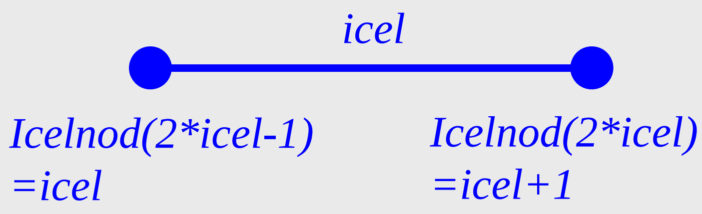
注意：プログラムの中では節点・要素番号は0からふられている（C言語）



プログラム：1d.f(2/6)

初期設定，配列宣言

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


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

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



Amat：　非零非対角成分
Item：　対応する列番号

各節点の非零非対角成分数は「2」
（ただし両端では「1」）

総数：2*(N-2)+1+1 = 2*N-2

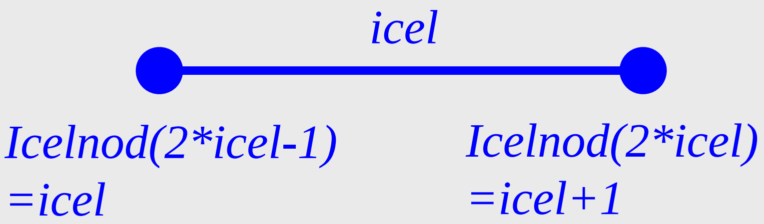
プログラム：1d.f(3/6)
配列宣言（続き），初期化

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

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

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

X： 各節点の座標

プログラム：1d.f(3/6)
配列宣言(続き)，初期化

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

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

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



プログラム：1d.f(3/6)

配列宣言（続き），初期化

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

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

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

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

プログラム：1d.f(4/6)

全体マトリクス：非零非対角成分に対応する列番号

```
!C
!C +---------------+
!C | CONNECTIVITY |
!C +---------------+
!C===
      INDEX  = 2

      INDEX(0)= 0
      INDEX(1)= 1
      INDEX(N)= 1

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

      NPLU= INDEX(N)

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

各節点の非零非対角成分数は「2」
（ただし両端では「1」）

総数：2*(N-2)+1+1 = 2*N-2
INDEX(N)= 2*N-2 = NPLU

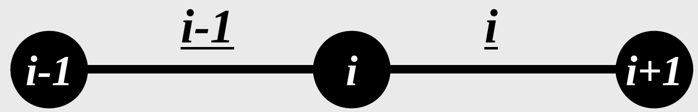
						非対角成分数	
							index(0)= 0
1	1.1 ①	2.4 ②	3.2 ⑤			2	index(1)= 2
2	3.6 ②	4.3 ①	2.5 ④	3.7 ⑥	9.1 ⑧	4	index(2)= 6
3	5.7 ③	1.5 ⑤	3.1 ⑦			2	index(3)= 8
4	9.8 ④	4.1 ②	2.5 ⑤	2.7 ⑥		3	index(4)= 11
5	11.5 ⑤	3.1 ①	9.5 ②	10.4 ③	4.3 ⑦	4	index(5)= 15
6	12.4 ⑥	6.5 ③	9.5 ⑦			2	index(6)= 17
7	23.1 ⑦	6.4 ②	2.5 ③	1.4 ⑥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

index(i-1)+1~index(i)番目がi行目の非対角成分

プログラム：1d.f（4/6）

全体マトリクス：非零非対角成分に対応する列番号

```
!C
!C +----------------+
!C | CONNECTIVITY |
!C +----------------+
!C===
      INDEX    = 2

      INDEX(0)= 0
      INDEX(1)= 1
      INDEX(N)= 1

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

      NPLU= INDEX(N)

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



						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

index(i-1)+1~index(i)番目がi行目の非対角成分

プログラム:1d.f(5/6)

全体マトリクス生成:要素マトリクス⇒全体マトリクス

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

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

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

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

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

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

プログラム：1d.f(5/6)

全体マトリクス生成：要素マトリクス⇒全体マトリクス

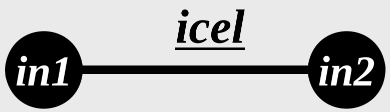
```
!C +-----------------+
!C | MATRIX ASSEMBLE |
!C +-----------------+
!C===
      do icel= 1, NE
        in1= ICELNOD(2*icel-1)
        in2= ICELNOD(2*icel  )
        X1 = X(in1)
        X2 = X(in2)
        DL = dabs(X2-X1)

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

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

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

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

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

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

プログラム：1d.f(5/6)

全体マトリクス生成：要素マトリクス⇒全体マトリクス

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

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

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

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

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

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



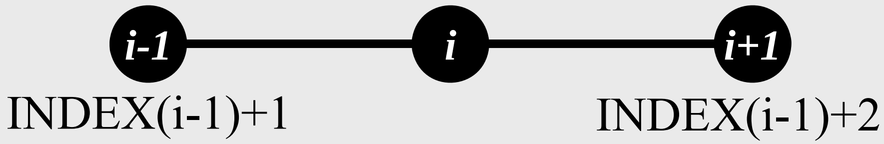
$$[Emat]=[k]^{(e)}=\frac{EA}{L}\begin{bmatrix} +1 & -1 \\ -1 & +1 \end{bmatrix}$$

プログラム：1d.f(5/6)

全体マトリクス生成：要素マトリクス⇒全体マトリクス

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

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

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

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

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

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

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



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

k1

k2

通常の要素：k1

in1の非対角成分としてのin2

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

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

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

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

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

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

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

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

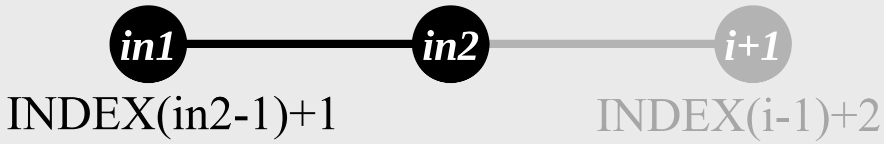
k1

通常の要素：k2

in2の非対角成分としてのin1

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

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

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

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

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

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

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



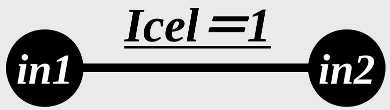
$$[Emat]=[k]^{(e)}=\frac{\lambda A}{L}\begin{bmatrix}+1 & -1\\ -1 & +1\end{bmatrix}$$

k2

1番要素（左端）：k1

in1の非対角成分としてのin2

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

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

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

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

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

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



「i」行の非対角成分：
INDEX[i-1]+1のみ

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

k1

プログラム：1d.f(5/6)

体積発熱項，右辺

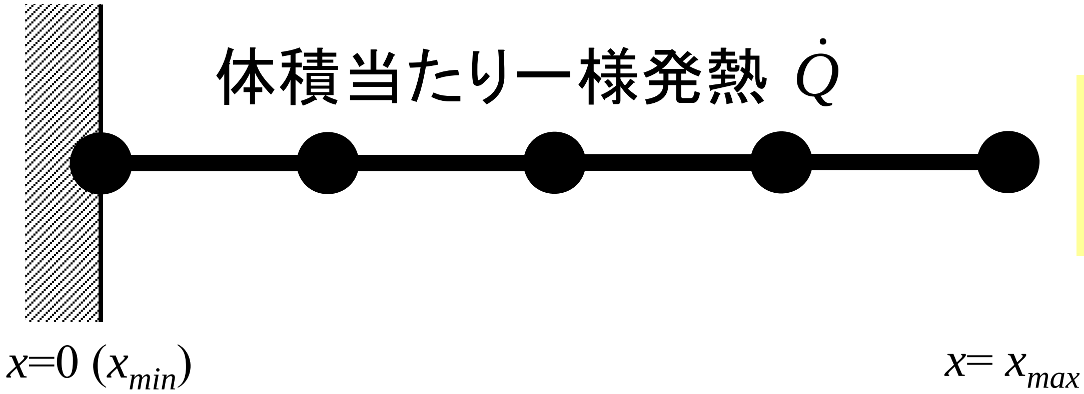
```
!C +-----------------+
!C | MATRIX ASSEMBLE |
!C +-----------------+
!C===
      do icel= 1, NE
        in1= ICELNOD(2*icel-1)
        in2= ICELNOD(2*icel  )
        X1 = X(in1)
        X2 = X(in2)
        DL = dabs(X2-X1)

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

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

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

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

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

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

プログラム：1d.f(6/6)
第一種境界条件@x=0

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

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

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

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

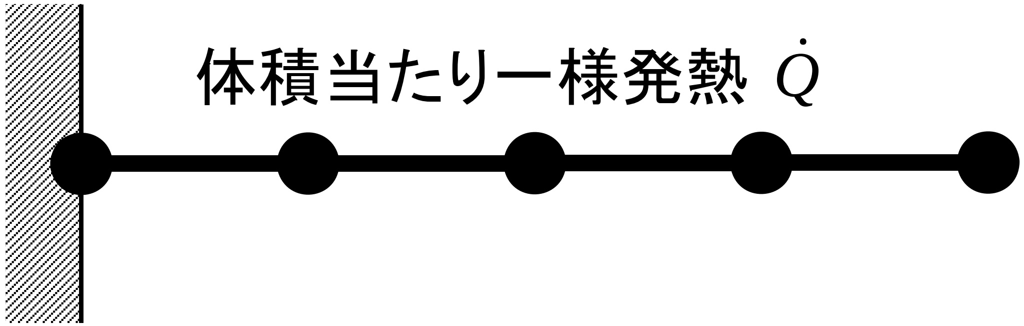
対象とする問題：一次元熱伝導問題



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

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

x=0で成立する方程式 $T_1=0$



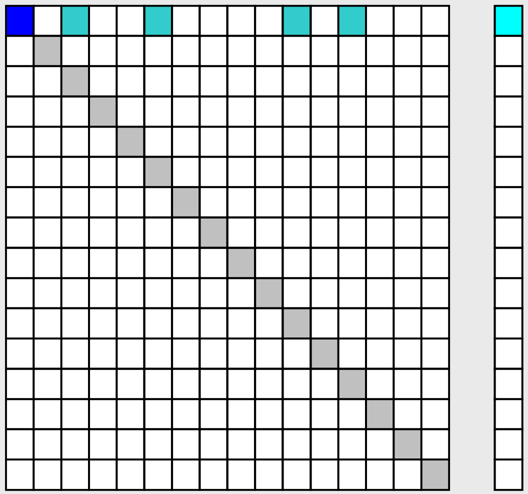
$$\frac{\partial}{\partial x}\left(\lambda\frac{\partial T}{\partial x}\right)+\dot{Q}=0$$

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

プログラム：1d.f(6/6)
第一種境界条件@x=0

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

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

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

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

$T_1=0$
対角成分=1，右辺=0，非対角成分=0

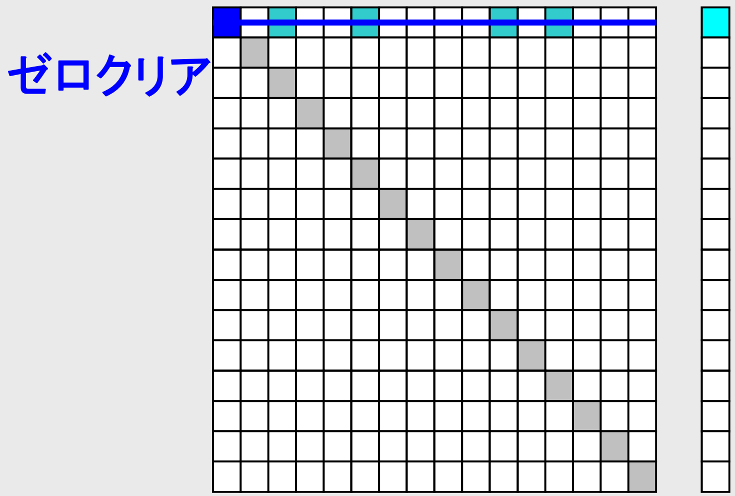


プログラム：1d.f(6/6)

第一種境界条件@x=0

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

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

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

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

$T_1=0$
対角成分=1，右辺=0，非対角成分=0



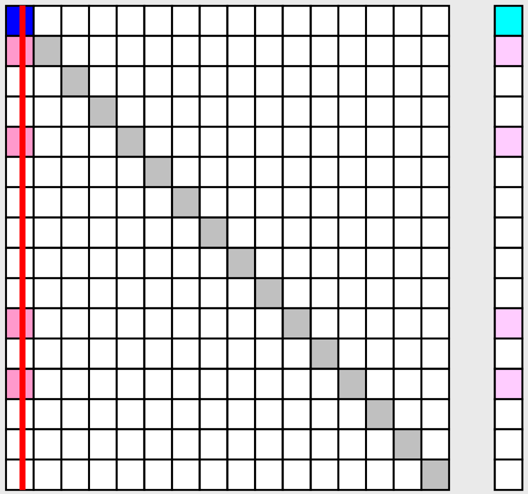
プログラム：1d.f(6/6)

第一種境界条件@x=0

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

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

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

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

$T_1=0$
対角成分=1，右辺=0，非対角成分=0

消去，ゼロクリア



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

第一種境界条件がT≠0の場合

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

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

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

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

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

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

第一種境界条件がT≠0の場合

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

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

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

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

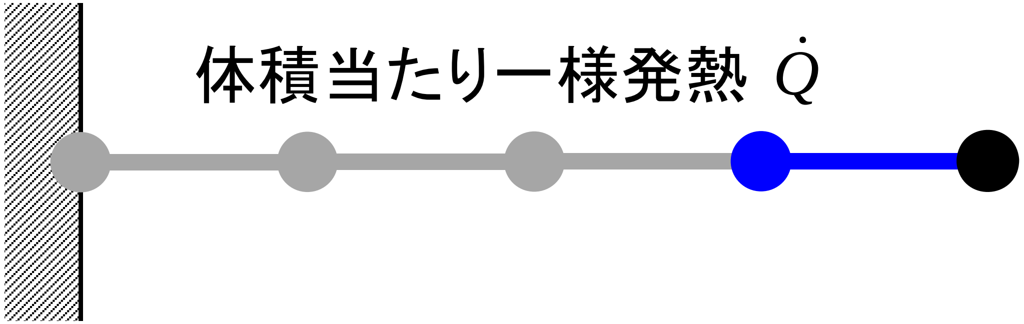
行列の対称性を保つため，第一種境界条件を適用している節点に対応する「列」を，右辺に移項して消去する

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

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

$$= Rhs_j - Amat_{k_s} T_{\min} \quad where\ Item(k_s) = 1$$

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 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：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)

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

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

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

Compute $r^{(0)}= b-[A]x^{(0)}$
<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（1/6）

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

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

対角成分の逆数（前処理用）
その都度，除算をすると効率が
悪いため，予め配列に格納

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

CGソルバー(2/6)

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

!C 初期残差
      do i= 1, N
        W(i,R) = DIAG(i)*PHI(i)
        do j= INDEX(i-1)+1, INDEX(i)
          W(i,R) = W(i,R) + AMAT(j)*PHI(ITEM(j))
        enddo
      enddo

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

BNRM2=|b|^2
あとで収束判定に使用

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

<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（3/6）

```
      do iter= 1, ITERmax

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

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

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

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

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

CGソルバー（4/6）

```
!C
!C-- {p} = {z} if      ITER=1
!C   BETA= RHO / RHO1  otherwise

      if ( iter.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-- {q}= [A]{p}

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

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

<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

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

  <u>else</u>

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

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

  <u>endif</u>

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

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

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

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

  check convergence $|r|$

<u>end</u>

CGソルバー（5/6）

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

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

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

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

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

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

      RESID= dsqrt(DNRM2/BNRM2)

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


    enddo
 900 continue
```

```
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
```

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

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

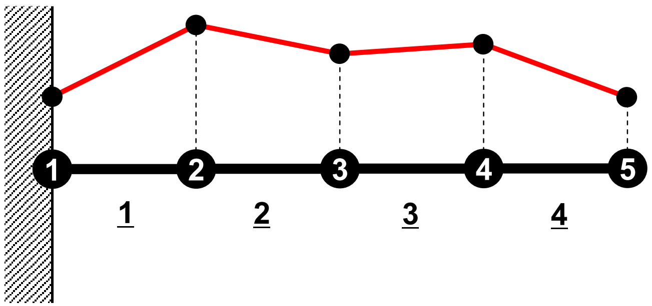
- 初期化
  - 制御変数読み込み
  - 座標読み込み⇒要素生成（N:節点数，NE：要素数）
  - 配列初期化（全体マトリクス，要素マトリクス）
  - 要素⇒全体マトリクスマッピング（Index，Item）
- マトリクス生成
  - 要素単位の処理（do icel= 1, NE）
    - 要素マトリクス計算
    - 全体マトリクスへの重ね合わせ
  - 境界条件の処理
- 連立一次方程式
  - 共役勾配法（CG）

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
```

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




```
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
```

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