

非線形有限要素法特論

2004 年 11 月 1 日

非線形有限要素法特論

- 講義内容は、非線形有限要素法の解説
- 夏学期の「非線形有限要素法の基礎」を受講していることが望まれる。
- 受講していない場合は、「非線形有限要素法のためのテンソル解析の基礎」久田俊明著、丸善を読んで理解しておくこと。
- 講義資料は<http://www.sml.k.u-tokyo.ac.jp/members/nabe/lecture2004>からダウンロードできるようにします。講義前日までに確定しますので各自プリントアウトして持参してください。
- <http://www.sml.k.u-tokyo.ac.jp/members/nabe/lecture2003> から昨年度の講義ノートがダウンロードできます。講義名が「有限要素法特論」ですが、基本的に同じ内容です。
- 今年度（2004）から新設した演習は、翌週の講義時間に提出してください。必須ではありませんし、採点しませんが、実際に手を動かして計算することは有限要素法の理解を深める上で重要です。
- 質問などは、nabe@sml.k.u-tokyo.ac.jp まで。

非線形有限要素法特論講義予定

1.	10/ 4	微分方程式の境界値問題の有限要素解析
2.	10/18	線形弾性体の有限要素解析
3.	10/25	アイソパラメトリックソリッド要素 (プログラム)
4.	11/ 1	連立一次方程式の数値解法と境界条件処理 (演習あり)
5.	11/ 8	線形有限要素法の基本的なプログラム構造 (プログラム)
6.	11/15	幾何学非線形問題の有限要素定式化 (プログラム)
7.	11/22	非線形方程式の静的解析手法、超弾性体、弾塑性体 (プログラム)
8.	11/29	第 7 回の演習
9.	12/ 6	非線形方程式の動的解析手法、固有値解析
10.	12/13	構造要素
11.	12/20	連立一次方程式の数値解法 — skyline 法、反復法
12.	1/17	ALE 有限要素流体解析
13.	1/24	ALE 有限要素流体解析

Gauss の消去法の例 1

- 以下のような連立 1 次方程式を例にとる. 係数マトリックスを $[A]$, 未知ベクトルを $\{b\}$, 右辺を $\{c\}$ と表す.

$$\begin{bmatrix} 5 & -4 & 1 & 0 \\ -4 & 6 & -4 & 1 \\ 1 & -4 & 6 & -4 \\ 0 & 1 & -4 & 5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ b_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

- この連立 1 次方程式を「ある決まった手順の繰り返し」で解く方法を考える. 便宜的に $[A^{(1)}] = [A]$, $\{c^{(1)}\} = \{c\}$ とおく.
- [step 1.] $[A^{(1)}]$ の 1 列目の対角項より下が 0 になるように 2 ~ 4 行目の方程式を右辺を含めて下式のように操作する.

$$2 \text{ 行目} - \left\{ \underbrace{(-4)}_{A_{21}^{(1)}} / \underbrace{5}_{A_{11}^{(1)}} \right\} \times 1 \text{ 行目}$$

$$3 \text{ 行目} - \left\{ \underbrace{1}_{A_{31}^{(1)}} / \underbrace{5}_{A_{11}^{(1)}} \right\} \times 1 \text{ 行目}$$

$$4 \text{ 行目} - \left\{ \underbrace{0}_{A_{41}^{(1)}} / \underbrace{5}_{A_{11}^{(1)}} \right\} \times 1 \text{ 行目}$$

- この操作により $[A^{(1)}]\{b\} = \{c^{(1)}\}$ は以下のように変形され, これを $[A^{(2)}]\{b\} = \{c^{(2)}\}$ と表す.

$$\begin{bmatrix} 5 & -4 & 1 & 0 \\ 0 & \frac{14}{5} & -\frac{16}{5} & 1 \\ 0 & -\frac{16}{5} & \frac{29}{5} & -4 \\ 0 & 1 & -4 & 5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ b_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

前進消去 1

- [step 2.]

$$\begin{bmatrix} 5 & -4 & 1 & 0 \\ 0 & \frac{14}{5} & -\frac{16}{5} & 1 \\ 0 & -\frac{16}{5} & \frac{29}{5} & -4 \\ 0 & 1 & -4 & 5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ b_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

- $[A^{(2)}]$ の 2 列目の対角項より下が 0 になるように次のように 3, 4 行目の方程式を右边を含めて下式のように操作する.

$$\begin{aligned} & \text{3 行目} - \left\{ \underbrace{\left(-\frac{16}{5}\right)}_{A_{23}^{(2)}} / \underbrace{\frac{14}{5}}_{A_{22}^{(2)}} \right\} \times \text{2 行目} \\ & \text{4 行目} - \left\{ \underbrace{1}_{A_{24}^{(2)}} / \underbrace{\frac{14}{5}}_{A_{22}^{(2)}} \right\} \times \text{2 行目} \end{aligned}$$

- この操作により $[A^{(2)}]\{b\} = \{c^{(2)}\}$ は以下のように変形され, これを $[A^{(3)}]\{b\} = \{c^{(3)}\}$ と表す.

$$\begin{bmatrix} 5 & -4 & 1 & 0 \\ 0 & \frac{14}{5} & -\frac{16}{5} & 1 \\ 0 & 0 & \frac{15}{7} & -\frac{20}{7} \\ 0 & 0 & -\frac{20}{7} & \frac{65}{14} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ b_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ \frac{8}{7} \\ -\frac{5}{14} \end{bmatrix}$$

前進消去 2

- [step 3.]

$$\begin{bmatrix} 5 & -4 & 1 & 0 \\ 0 & \frac{14}{5} & -\frac{16}{5} & 1 \\ 0 & 0 & \frac{15}{7} & -\frac{20}{7} \\ 0 & 0 & -\frac{20}{7} & \frac{65}{14} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ b_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ \frac{8}{7} \\ -\frac{5}{14} \end{bmatrix}$$

- $[A^{(3)}]$ の 3 列目の対角項より下が 0 になるように 4 行目の方程式を右辺を含めて下式のように操作する.

$$4 \text{ 行目} - \left\{ \underbrace{\left(-\frac{20}{7}\right)}_{A_{34}^{(3)}} / \underbrace{\frac{15}{7}}_{A_{44}^{(3)}} \right\} \times 3 \text{ 行目}$$

- この操作により $[A^{(3)}]\{b\} = \{c^{(3)}\}$ は以下のように変形され, これを $[A^{(4)}]\{b\} = \{c^{(4)}\}$ と表す.

$$\begin{bmatrix} 5 & -4 & 1 & 0 \\ 0 & \frac{14}{5} & -\frac{16}{5} & 1 \\ 0 & 0 & \frac{15}{7} & -\frac{20}{7} \\ 0 & 0 & 0 & \frac{5}{6} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ b_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ \frac{8}{7} \\ \frac{7}{6} \end{bmatrix}$$

- ここまでの操作により連立一次方程式は, 上三角行列¹を係数マトリックスに持つ連立 1 次方程式に変換された. 以上の操作を前進消去 (forward reduction) と呼ぶ.

¹対角項より下の成分がすべて 0 であるような行列を上三角行列という. 同様に対角項より上の成分が全て 0 であるような行列を下三角行列と言う.

後退代入

- このようにして得られた上三角行列を係数マトリックスに持つ連立一次方程式の未知数 $\{b\}$ は b_4, b_3, b_2, b_1 の順に以下のように求める事が出来る. この操作を後退代入 (backward substitution) と呼ぶ.

$$\begin{bmatrix} 5 & -4 & 1 & 0 \\ 0 & \frac{14}{5} & -\frac{16}{5} & 1 \\ 0 & 0 & \frac{15}{7} & -\frac{20}{7} \\ 0 & 0 & 0 & \frac{5}{6} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ b_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ \frac{8}{7} \\ \frac{7}{6} \end{bmatrix}$$

[step 1.]

$$b_4 = \underbrace{\frac{7}{6}}_{c_4^{(4)}} / \underbrace{\frac{5}{6}}_{A_{44}^{(4)}} = \frac{7}{5}$$

[step 2.]

$$b_3 = \left\{ \underbrace{\frac{8}{7}}_{c_3^{(4)}} - \underbrace{\left(-\frac{20}{7}\right)}_{A_{34}^{(4)}} \cdot \underbrace{\frac{7}{5}}_{b_4} \right\} / \underbrace{\frac{15}{7}}_{A_{33}^{(4)}} = \frac{12}{5}$$

[step 3.]

$$b_2 = \left\{ \underbrace{1}_{c_2^{(4)}} - \underbrace{\left(-\frac{16}{5}\right)}_{A_{23}^{(4)}} \cdot \underbrace{\frac{12}{5}}_{b_3} - \underbrace{1}_{A_{24}^{(4)}} \cdot \underbrace{\frac{7}{5}}_{b_4} \right\} / \underbrace{\frac{14}{5}}_{A_{22}^{(4)}} = \frac{13}{5}$$

[step 4.]

$$b_1 = \left\{ \underbrace{0}_{c_1^{(4)}} - \underbrace{(-4)}_{A_{12}^{(4)}} \cdot \underbrace{\frac{13}{5}}_{b_2} - \underbrace{1}_{A_{13}^{(4)}} \cdot \underbrace{\frac{12}{5}}_{b_3} - \underbrace{0}_{A_{14}^{(4)}} \cdot \underbrace{\frac{7}{5}}_{b_4} \right\} / \underbrace{5}_{A_{11}^{(4)}} = \frac{8}{5}$$

後退消去 1

- あるいは, 以下のような方法でも出来る. この操作を後退消去 (backward reduction) と呼ぶ. ここでは $c_i^{(4,0)} = c_i^{(4)}$ とおく.

$$\begin{bmatrix} 5 & -4 & 1 & 0 \\ 0 & \frac{14}{5} & -\frac{16}{5} & 1 \\ 0 & 0 & \frac{15}{7} & -\frac{20}{7} \\ 0 & 0 & 0 & \frac{5}{6} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ b_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ \frac{8}{7} \\ \frac{7}{6} \end{bmatrix}$$

[step 1.]

まず, 第四行の式から, b_4 が求められる.

$$b_4 = \underbrace{\frac{7}{6}}_{c_4^{(4,0)}} / \underbrace{\frac{5}{6}}_{A_{44}^{(4)}} = \frac{7}{5}$$

ここで, 元々の連立一次方程式に立ち返ると

$$\begin{cases} 5b_1 + -4b_2 + 1b_3 + 0b_4 = 0 \\ 0b_1 + \frac{14}{5}b_2 + -\frac{16}{5}b_3 + 1b_4 = 1 \\ 0b_1 + 0b_2 + \frac{15}{7}b_3 + -\frac{20}{7}b_4 = \frac{8}{7} \\ 0b_1 + 0b_2 + 0b_3 + \frac{5}{6}b_4 = \frac{7}{6} \end{cases}$$

このうち, 第四行はすでに b_4 が求められているので除外する. また, 第 1 ~ 3 行についても, b_4 については既

知であるので，左辺に移項する．

$$\begin{cases} 5b_1 + -4b_2 + 1b_3 = 0 & -(0b_4) \\ 0b_1 + \frac{14}{5}b_2 + -\frac{16}{5}b_3 = 1 & -(1b_4) \\ 0b_1 + 0b_2 + \frac{15}{7}b_3 = \frac{8}{7} & -(-\frac{20}{7}b_4) \end{cases}$$

これをマトリックスの形式で表せば以下のようなになる．

$$\begin{bmatrix} 5 & -4 & 1 \\ 0 & \frac{14}{5} & -\frac{16}{5} \\ 0 & 0 & \frac{15}{7} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ \frac{8}{7} \end{bmatrix} - b_4 \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ -\frac{20}{7} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ -\frac{2}{5} \\ \frac{36}{7} \end{bmatrix}$$

すなわち，右辺の値のみで考えると，以下のような処理をしている．

$$\begin{aligned} c_1^{(4,1)} &= \underbrace{0}_{c_1^{(4,0)}} - \underbrace{0}_{A_{14}^{(4)}} \cdot \underbrace{\frac{7}{5}}_{b_4} = 0 \\ c_2^{(4,1)} &= \underbrace{1}_{c_2^{(4,0)}} - \underbrace{1}_{A_{24}^{(4)}} \cdot \underbrace{\frac{7}{5}}_{b_4} = -\frac{2}{5} \\ c_3^{(4,1)} &= \underbrace{\frac{8}{7}}_{c_3^{(4,0)}} - \underbrace{\left(-\frac{20}{7}\right)}_{A_{34}^{(4)}} \cdot \underbrace{\frac{7}{5}}_{b_4} = \frac{36}{7} \end{aligned}$$

後退消去 2

$$\begin{bmatrix} 5 & -4 & 1 \\ 0 & \frac{14}{5} & -\frac{16}{5} \\ 0 & 0 & \frac{15}{7} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ -\frac{2}{5} \\ \frac{36}{7} \end{bmatrix}$$

[step 2.]

$$b_3 = \underbrace{\frac{36}{7}}_{c_3^{(4,1)}} / \underbrace{\frac{15}{7}}_{A_{33}^{(4)}} = \frac{12}{5}$$

$$c_1^{(4,2)} = \underbrace{0}_{c_1^{(4,1)}} - \underbrace{1}_{A_{13}^{(4)}} \cdot \underbrace{\frac{12}{5}}_{b_3} = -\frac{12}{5}$$

$$c_2^{(4,2)} = \underbrace{\frac{2}{5}}_{c_2^{(4,1)}} - \underbrace{\left(-\frac{16}{5}\right)}_{A_{23}^{(4)}} \cdot \underbrace{\frac{12}{5}}_{b_3} = \frac{182}{25}$$

$$\begin{bmatrix} 5 & -4 \\ 0 & \frac{14}{5} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ -\frac{2}{5} \end{bmatrix} - b_3 \begin{bmatrix} 1 \\ -\frac{16}{5} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\frac{12}{5} \\ \frac{182}{25} \end{bmatrix}$$

[step 3.]

$$b_2 = \frac{\underbrace{182}_{c_2^{(4,2)}}}{\underbrace{25}_{A_{22}^{(4)}}} / \frac{14}{5} = \frac{13}{5}$$
$$c_1^{(4,3)} = -\frac{\underbrace{12}_{c_1^{(4,2)}}}{5} - \underbrace{(-4)}_{A_{12}^{(4)}} \cdot \frac{\underbrace{13}_{b_2}}{5} = 8$$
$$5 \cdot b_1 = -\frac{12}{5} - b_2 \cdot (-4) = 8$$

[step 4.]

$$b_1 = \frac{\underbrace{8}_{c_1^{(4,3)}}}{\underbrace{5}_{A_{11}^{(4)}}} = \frac{8}{5}$$

後退代入と後退消去

- 後退代入と後退消去はかなり異なった手続きで、手計算で解く際には後退消去は煩雑な印象を受けるが、未知数を全て求めるのに必要な演算数は同じ
- 各 step 内に現れる係数マトリックスの成分に着目すると、後退代入では行が固定されており、一方後退消去では列が固定されている
- 後退代入と後退消去の違いはコーディングを行う際には loop index のとり方として反映され、係数マトリックスの記憶方法により使い分けられる。
- 実際の有限要素コードでは skyline 法と呼ばれる Gauss の消去法を基に効率化を図った手法が事実上の標準として用いられることが多いが、skyline 法は後退消去を採用している。

三角分解 2

- 従って, 係数行列を $[A]$, $[A]$ から得られる上三角行列を $[S]$, $[P_n]$ を適当な基本行列として以下のような形式の関係が成立することになる.

$$[P_n] \dots [P_2][P_1][A] = [S]$$

- 例として, 前述のマトリックスを上記の形式で表すと以下のようなになる

$$\underbrace{\begin{bmatrix} 1 & & & 0 \\ 0 & 1 & & \\ 0 & 0 & 1 & \\ 0 & 0 & -\frac{4}{3} & 1 \end{bmatrix}}_{step3}
 \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & & & 0 \\ 0 & 1 & & \\ 0 & 0 & 1 & \\ 0 & \frac{5}{14} & 0 & 1 \end{bmatrix}}_{step2}
 \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & & & 0 \\ 0 & 1 & & \\ 0 & -\frac{8}{7} & 1 & \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}}_{step1}
 \begin{bmatrix} 1 & & & 0 \\ 0 & 1 & & \\ 0 & 0 & 1 & \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}
 \begin{bmatrix} 1 & & & 0 \\ 0 & 1 & & \\ 0 & \frac{1}{5} & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}
 \begin{bmatrix} 1 & & & 0 \\ 0 & 1 & & \\ 0 & 0 & 1 & \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}
 \begin{bmatrix} 1 & & & 0 \\ 0 & 1 & & \\ 0 & 0 & 1 & \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 5 & -4 & 1 & 0 \\ -4 & 6 & -4 & 1 \\ 1 & -4 & 6 & -4 \\ 0 & 1 & -4 & 5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 5 & -4 & 1 & 0 \\ 0 & \frac{14}{5} & -\frac{16}{5} & 1 \\ 0 & 0 & \frac{15}{7} & -\frac{20}{7} \\ 0 & 0 & 0 & \frac{5}{6} \end{bmatrix}$$

三角分解 3

- ここで各ステップごとに用いている基本行列の積を計算してみると以下のように対角項はすべて 1 上三角部分はすべて 0 下三角部分是对应する列にのみ非零の値になっている。
- また、これらのマトリックスのかけ算の順を変えても、結果として得られるマトリックスは同一

step 1.

$$\begin{bmatrix} 1 & & & 0 \\ 0 & 1 & & \\ 0 & 0 & 1 & \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & & & 0 \\ 0 & 1 & & \\ \frac{1}{5} & 0 & 1 & \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & & & 0 \\ -\frac{4}{5} & 1 & & \\ 0 & 0 & 1 & \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & & & 0 \\ -\frac{4}{5} & 1 & & \\ \frac{1}{5} & 0 & 1 & \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

step 2.

$$\begin{bmatrix} 1 & & & 0 \\ 0 & 1 & & \\ 0 & 0 & 1 & \\ 0 & \frac{5}{14} & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & & & 0 \\ 0 & 1 & & \\ 0 & -\frac{8}{7} & 1 & \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & & & 0 \\ 0 & 1 & & \\ 0 & -\frac{8}{7} & 1 & \\ 0 & \frac{5}{14} & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

step 3.

$$\begin{bmatrix} 1 & & & 0 \\ 0 & 1 & & \\ 0 & 0 & 1 & \\ 0 & 0 & -\frac{4}{3} & 1 \end{bmatrix}$$

の符号を換えたものになる.

$$\begin{bmatrix} 1 & & & & 0 \\ & \ddots & & & \\ & & 1 & & \\ & & C_{i+1} & 1 & \\ 0 & & \vdots & & \ddots \\ & & C_n & 0 & & 1 \end{bmatrix}^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & & & & 0 \\ & \ddots & & & \\ & & 1 & & \\ & & -C_{i+1} & 1 & \\ 0 & & \vdots & & \ddots \\ & & -C_n & 0 & & 1 \end{bmatrix}$$

基本行列による三角分解 2

- 係数マトリックス $[A]$ の次元を n とすると, この $[L_i^{-1}]$ を用い, 前節で説明した前進消去の操作は以下のように表すことができ, $[A^{(n)}]$ は上三角行列になっている.

$$[A^{(2)}] = [L_1^{-1}][A^{(1)}]$$

⋮

$$[A^{(n)}] = [L_{n-1}^{-1}][A^{(n-1)}]$$

- $[S] = [A^{(n)}]$ とすれば, 以下のように書くことができる.

$$[L_{n-1}^{-1}] \cdots [L_2^{-1}][L_1^{-1}][A] = [S]$$

基本行列による三角分解 3

$$[A^{(1)}] = \begin{bmatrix} 5 & -4 & 1 & 0 \\ -4 & 6 & -4 & 1 \\ 1 & -4 & 6 & -4 \\ 0 & 1 & -4 & 5 \end{bmatrix}$$

$$[L_1^{-1}] = \begin{bmatrix} 1 & & & 0 \\ -L_{2,1} & 1 & & \\ -L_{3,1} & 0 & 1 & \\ -L_{4,1} & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad \text{但し} \quad \begin{cases} L_{2,1} = \frac{A_{2,1}^{(1)}}{A_{1,1}^{(1)}} = -\frac{4}{5} \\ L_{3,1} = \frac{A_{3,1}^{(1)}}{A_{1,1}^{(1)}} = \frac{1}{5} \\ L_{4,1} = \frac{A_{4,1}^{(1)}}{A_{1,1}^{(1)}} = \frac{0}{5} = 0 \end{cases}$$

$$[L_1^{-1}][A^{(1)}] = \begin{bmatrix} 5 & -4 & 1 & 0 \\ 0 & \frac{14}{5} & -\frac{16}{5} & 1 \\ 0 & -\frac{16}{5} & \frac{29}{5} & -4 \\ 0 & 1 & -4 & 5 \end{bmatrix} = [A^{(2)}]$$

$$[L_2^{-1}] = \begin{bmatrix} 1 & & & 0 \\ 0 & 1 & & \\ 0 & -L_{3,2} & 1 & \\ 0 & -L_{4,2} & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad \text{但し} \quad \begin{cases} L_{3,2} = \frac{A_{3,2}^{(2)}}{A_{2,2}^{(2)}} = -\frac{8}{7} \\ L_{4,2} = \frac{A_{4,2}^{(2)}}{A_{2,2}^{(2)}} = \frac{5}{14} \end{cases}$$

$$[L_2^{-1}][A^{(2)}] = \begin{bmatrix} 5 & -4 & 1 & 0 \\ 0 & \frac{14}{5} & -\frac{16}{5} & 1 \\ 0 & 0 & \frac{15}{7} & -\frac{20}{7} \\ 0 & 0 & -\frac{20}{7} & \frac{65}{14} \end{bmatrix} = [A^{(3)}]$$

$$[L_3^{-1}] = \begin{bmatrix} 1 & & & 0 \\ 0 & 1 & & \\ 0 & 0 & 1 & \\ 0 & 0 & -L_{4,3} & 1 \end{bmatrix} \quad \text{但し } L_{4,3} = \frac{A_{4,3}^{(3)}}{A_{3,3}^{(3)}} = -\frac{4}{3}$$

$$[L_3^{-1}][A^{(3)}] = \begin{bmatrix} 5 & -4 & 1 & 0 \\ 0 & \frac{14}{5} & -\frac{16}{5} & 1 \\ 0 & 0 & \frac{15}{7} & -\frac{20}{7} \\ 0 & 0 & 0 & \frac{5}{6} \end{bmatrix} = [A^{(4)}] = [S]$$

- この $[L]$ を用いれば $[A]$ は

$$[A] = [L][S]$$

と下三角行列 $[L]$ と上三角行列 $[S]$ の積の形に分解できることが分かる. これを三角分解と呼ぶ.

基本行列による三角分解 5

- $[S]$ の対角項は, 三角分解の途中や, 未知ベクトルを求めるときに, 割り算の分母として用いられるため, $[S]$ の対角項を並べた対角行列を $[D]$ として $[S] = [D][U]$ とさらに分解する場合が多い.
- $[D], [U]$ を成分で書けば, 以下のようになる.

$$\begin{aligned}
 [S] &= \begin{bmatrix} S_{11} & S_{12} & \cdots & S_{1n} \\ & S_{22} & & \vdots \\ & & \ddots & \vdots \\ 0 & & & S_{nn} \end{bmatrix} \\
 &= \begin{bmatrix} S_{11} & & & 0 \\ & S_{22} & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & S_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} S_{11}/S_{11} & S_{12}/S_{11} & \cdots & S_{1n}/S_{11} \\ & S_{22}/S_{22} & \cdots & S_{2n}/S_{22} \\ & & \ddots & \vdots \\ 0 & & & S_{nn}/S_{nn} \end{bmatrix} \\
 &= \begin{bmatrix} S_{11} & & & 0 \\ & S_{22} & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & S_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & S_{12}/S_{11} & \cdots & S_{1n}/S_{11} \\ & 1 & & S_{2n}/S_{22} \\ & & \ddots & \vdots \\ 0 & & & 1 \end{bmatrix}
 \end{aligned}$$

- これより

$$[D] = \begin{bmatrix} S_{11} & & & 0 \\ & S_{22} & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & S_{nn} \end{bmatrix}$$
$$[U] = \begin{bmatrix} 1 & S_{12}/S_{11} & \cdots & S_{1n}/S_{11} \\ & 1 & & S_{2n}/S_{22} \\ & & \ddots & \vdots \\ 0 & & & 1 \end{bmatrix}$$

- これからわかるように $[U]$ の対角項は $[L]$ 同様全て 1 である.

基本行列による三角分解 6

- この操作により $[A]$ は最終的に下式のように分解される.

$$[A] = [L][D][U]$$

- このような形式にすることにより, コーディングをする際にも loop index をシンメトリックに構成することができる
- また $[A]$ が対称行列ならば $[U] = [L^T]$ である. すなわち $[A]$ は下式のように分解される.²

$$[A] = [L][D][L^T] = [U^T][D][U]$$

²なお慣用的に論文や雑誌などの文章中出现くるときは $[L][D][L^T]$ と記述されている場合が多いが, そのような論文や書籍に掲載されているプログラム例では上三角行列を記憶し, $[U^T][D][U]$ と分解している場合が多い.

三角行列と連立一次方程式の求解 1

- このように $[A] = [L][D][U]$ と分解することにより, 連立 1 次方程式 $[A]\{b\} = \{c\}$ は, 以下のように両辺に順次逆行列を作用させて行くようにして求解できる.

$$[L][D][U]\{b\} = \{c\}$$

$$[D][U]\{b\} = [L^{-1}]\{c\}$$

$$[U]\{b\} = [D^{-1}][L^{-1}]\{c\}$$

$$\{b\} = [U^{-1}][D^{-1}][L^{-1}]\{c\}$$

- まず $[L^{-1}]\{c\}$ を求める. これを $\{x\} = [L^{-1}]\{c\}$ とおけば, $\{x\}$ は以下に示すような下三角行列を係数マトリックスとする連立 1 次方程式の解である.

$$[L]\{x\} = \{c\}$$

- このような連立 1 次方程式であれば, 前進代入 (forward substitution) すなわち先に説明した後退代入をちょうど逆にした操作により求解される. 具体的には以下のようなになる.

$$x_1 = c_1$$

$$x_2 = c_2 - L_{21}x_1$$

$$x_3 = c_3 - L_{31}x_1 - L_{32}x_2$$

⋮

- 当然ながら後退消去と同様に前進消去を考えることも可能だが, skyline 法では用いられないのでここでは割愛する.

三角行列と連立一次方程式の求解 2

- 次に $[D^{-1}][L^{-1}]\{c\}$ を求める. 先に求めた $\{x\}$ を用いれば, $[D^{-1}][L^{-1}]\{c\} = [D^{-1}]\{x\}$ でありこれを $\{y\} = [D^{-1}]\{x\}$ とおけば $\{y\}$ は以下に示すような対角行列を係数マトリックスとする連立1次方程式の解である.

$$[D]\{y\} = \{x\}$$

- このような連立1次方程式なら単なる割算で求解される. 具体的には以下のようなになる.

$$y_i = x_i / D_{ii} \quad (i = 1 \sim n)$$

- 最後に $[U^{-1}][D^{-1}][L^{-1}]\{c\}$ を求める. これは先に求めた $\{y\}$ を用いれば $\{b\} = [U^{-1}]\{y\}$ であり, $\{b\}$ は以下に示す上三角行列を係数マトリックスとする連立1次方程式の解である.

$$[U]\{b\} = \{y\}$$

- このような連立1次方程式は後退消去あるいは後退代入により求解される.

三角行列と連立一次方程式の求解 3

- 三角分解が完了していれば, この操作は三角分解を行うよりもはるかに少ない計算量で実行できる. また, 異なる右辺のベクトルが多数存在する場合には, 同じ係数マトリックスを用いて非常に効率良く解を求めることが可能である.
- 前進消去のところで示した例では最終的に得られた係数マトリックス $[A^{(4)}]$ は $[S]$, 右辺のベクトル $\{c^{(4)}\}$ は $\{x\} = [L^{-1}]\{c\}$ に対応している.
- 例について実際に計算してみると, 以下のようになる.

$$[L] = \begin{bmatrix} 1 & & & 0 \\ -\frac{4}{5} & 1 & & \\ \frac{1}{5} & -\frac{8}{7} & 1 & \\ 0 & \frac{5}{14} & -\frac{4}{3} & 1 \end{bmatrix}$$
$$[D] = \begin{bmatrix} 5 & & & 0 \\ & \frac{14}{5} & & \\ & & \frac{15}{7} & \\ 0 & & & \frac{5}{6} \end{bmatrix}$$

$$[U] = [L^T] = \begin{bmatrix} 1 & -\frac{4}{5} & \frac{1}{5} & 0 \\ & 1 & -\frac{8}{7} & \frac{5}{14} \\ & & 1 & -\frac{4}{3} \\ 0 & & & 1 \end{bmatrix}$$

$$[L^{-1}] = [L_{n-1}^{-1}] \cdots [L_2^{-1}][L_1^{-1}] = \begin{bmatrix} 1 & & & \\ \frac{4}{5} & 1 & & 0 \\ \frac{5}{7} & \frac{8}{7} & 1 & \\ \frac{2}{3} & \frac{7}{6} & \frac{4}{3} & 1 \end{bmatrix}$$

$$[L^{-1}]\{c\} = \begin{bmatrix} 1 & & & 0 \\ \frac{4}{5} & 1 & & \\ \frac{5}{7} & \frac{8}{7} & 1 & \\ \frac{2}{3} & \frac{7}{6} & \frac{4}{3} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ \frac{8}{7} \\ \frac{7}{6} \end{bmatrix} = \{c^{(4)}\}$$

三角行列の積 1

- Gauss の消去法のコーディングにはさまざまな流儀のようなものがある。ここで取り上げるものはその中の一つに過ぎないが

1. 何をどう計算しているか分かりやすい。
2. 後に導入する, skyline 法と呼ばれる手法と基本的に同じ構造である。

という特徴がある。

- これまで一般のマトリックスが三角分解できることを示したが, ここでは逆に三角分解されたマトリックスから出発する。例として以下の 4×4 のマトリックスを考える。

$$[L] = \begin{bmatrix} 1 & & & \\ L_{21} & 1 & & \\ L_{31} & L_{32} & 1 & \\ L_{41} & L_{42} & L_{43} & 1 \end{bmatrix} \quad [D] = \begin{bmatrix} D_{11} & & & \\ & D_{22} & & \\ & & D_{33} & \\ 0 & & & D_{44} \end{bmatrix} \quad [U] = \begin{bmatrix} 1 & U_{12} & U_{13} & U_{14} \\ & 1 & U_{23} & U_{24} \\ & & 1 & U_{34} \\ 0 & & & 1 \end{bmatrix}$$

- この $[L]$, $[D]$, $[U]$ の積をとると $[A] = [L][D][U]$ として以下のようになる。

$$[A] = \begin{bmatrix} D_{11} & D_{11}U_{12} & D_{11}U_{13} & D_{11}U_{14} \\ L_{21}D_{11} & L_{21}D_{11}U_{12} + D_{22} & L_{21}D_{11}U_{13} + D_{22}U_{23} & L_{21}D_{11}U_{14} + D_{22}U_{24} \\ L_{31}D_{11} & L_{31}D_{11}U_{12} + L_{32}D_{22} & L_{31}D_{11}U_{13} + L_{32}D_{22}U_{23} + D_{33} & L_{31}D_{11}U_{14} + L_{32}D_{22}U_{24} + D_{33}U_{34} \\ L_{41}D_{11} & L_{41}D_{11}U_{12} + L_{42}D_{22} & L_{41}D_{11}U_{13} + L_{42}D_{22}U_{23} + L_{43}D_{33} & L_{41}D_{11}U_{14} + L_{42}D_{22}U_{24} + L_{43}D_{33}U_{34} + D_{44} \end{bmatrix}$$

三角行列の積 2

- これは一般に以下のようにインデックスを用いて表すことができる.

$$A_{11} = D_{11}$$

$$A_{1i} = D_{11}U_{1i} \quad i = 2 \sim n$$

$$A_{i1} = L_{i1}D_{11} \quad i = 2 \sim n$$

$i \geq 2$ で

$$A_{ij} = D_{ii}U_{ij} + \sum_{k=1}^{i-1} L_{ik}D_{kk}U_{kj} \quad (i < j : \text{上三角側})$$

$$A_{ij} = L_{ij}D_{jj} + \sum_{k=1}^{j-1} L_{ik}D_{kk}U_{kj} \quad (i > j : \text{下三角側})$$

$$A_{ii} = D_{ii} + \sum_{k=1}^{i-1} L_{ik}D_{kk}U_{ki} \quad (i = j)$$

三角分解の手順

この関係を用いると $[L]$, $[D]$, $[U]$ は以下のように順次計算できる.

$$j = 1$$

$$D_{11} = A_{11}$$

$$j = 2$$

$$\begin{cases} U_{12} = A_{12}/D_{11} \\ L_{21} = A_{21}/D_{11} \end{cases}$$

$$D_{22} = A_{22} - L_{21}D_{11}U_{12}$$

$$j = 3$$

$$\begin{cases} U_{13} = A_{13}/D_{11} \\ L_{31} = A_{31}/D_{11} \end{cases}$$
$$\begin{cases} U_{23} = (A_{23} - L_{21}D_{11}U_{13})/D_{22} \\ L_{32} = (A_{32} - L_{31}D_{11}U_{12})/D_{22} \end{cases}$$
$$D_{33} = A_{33} - L_{31}D_{11}U_{13} - L_{32}D_{22}U_{23}$$
$$\vdots$$

境界条件処理

- 下図に示すように, x_1 軸に並行した $n + 1$ 個の質点 (各質点の質量 $m_i (i = 1 \sim n + 1)$) を n 個のばね (各ばねのばね定数 $k_i (i = 1 \sim n)$) で連結した系を考える.
- それぞれの質点は x_i 方向にしか運動しないように拘束されているとし, 各質点に外力 $f_i (i = 1 \sim n + 1)$ が作用するとき, 各質点の運動方程式は以下ようになる.

$$\begin{aligned}
 m_1 \ddot{u}_1 &= f_1 && + k_1(u_2 - u_1) \\
 m_2 \ddot{u}_2 &= f_2 &+ k_1(u_1 - u_2) &+ k_2(u_3 - u_2) \\
 m_3 \ddot{u}_3 &= f_3 &+ k_2(u_2 - u_3) &+ k_3(u_4 - u_3) \\
 &\vdots && \\
 m_n \ddot{u}_n &= f_n &+ k_{n-1}(u_{n-1} - u_n) &+ k_n(u_{n+1} - u_n) \\
 m_{n+1} \ddot{u}_{n+1} &= f_{n+1} &+ k_n(u_n - u_{n+1}) &
 \end{aligned}$$

ただし $u_i (i = 1 \sim n + 1)$ は質点 m_i の x_1 方向変位とする.

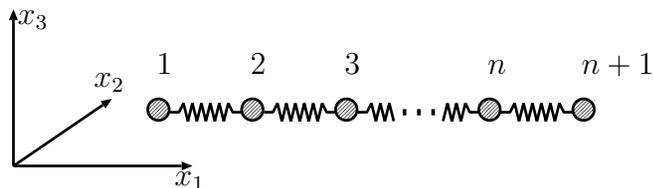


図 1: ばね - 質点系

境界条件処理 2

- これをマトリックスで表すと次のようになる.

$$\begin{bmatrix} k_1 & -k_1 & & & & \\ -k_1 & k_1+k_2 & -k_2 & & & \\ & -k_2 & k_2+k_3 & -k_3 & & \\ & & & \ddots & & \\ & & & & -k_{n-1} & k_{n-1}+k_n & -k_n \\ & & & & & -k_n & k_{n+1} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ \vdots \\ u_n \\ u_{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_1 - m_1 \ddot{u}_1 \\ f_2 - m_2 \ddot{u}_2 \\ f_3 - m_3 \ddot{u}_3 \\ \vdots \\ f_n - m_n \ddot{u}_n \\ f_{n+1} - m_{n+1} \ddot{u}_{n+1} \end{pmatrix}$$

- ここで, $\ddot{u}_1 = \ddot{u}_2 = \cdots = \ddot{u}_n = \ddot{u}_{n+1} = 0, \dot{u}_1 = \dot{u}_2 = \cdots = \dot{u}_n = \dot{u}_{n+1} = 0$ の場合を考える. このとき, 物理的には力のつりあい状態は保たれるが, 系全体がどこでつりあうかは決まらない. また, 係数マトリックスも特異で rank は n である.
- 通常の問題設定では, 例えば $u_1 = 0$ など, 何らかの条件を追加し, 求解する. あるいは, $v_1 = u_2 - u_1, v_2 = u_3 - u_2, \cdots, v_n = u_{n+1} - u_n$ と新たに変数を設定し直して求解するのが一般的である. なお, v_1, \dots, v_n はバネの伸びに相当する.

境界条件処理 3

- 一般に静的な問題の有限要素解析で用いる剛性マトリクスは、力のつりあい方程式を離散化して得られるもので、系全体がどこでつりあうのかということは式には反映されない。
- 即ち、剛性マトリックスは特異であり、 $u_1 = 0$ などのように変位に条件を加えないと解くことができない。
- また、値自体は未知であるが、ある適当な値の仮想外力を作用させて、 $u_j = a$ など、ある箇所の変位を任意の目標値にするような問題設定を行う場合もある。
- このときには u_j が既知でありかつ非零で、また f_j は未知である。
- 有限要素解析では、このように本来は未知量である変位の一部を既知量として取り扱うケースを一般に境界条件処理、特に既知量が 0 でないようなケースを強制変位と呼ぶ。

境界条件処理 4

- 以下のような連立一次方程式を考える.

$$\begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots & A_{1n} \\ A_{21} & & & \vdots \\ \vdots & & & \vdots \\ A_{n1} & \cdots & \cdots & A_{nn} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} C_1 \\ C_2 \\ \vdots \\ C_n \end{Bmatrix}$$

- ここで, C_j 以外の右辺と b_j が既知であるとする. マトリックス形式を通常の連立一次方程式の形式に書き戻すと以下のようなになる.

$$\begin{cases} A_{11} + A_{12}b_2 + \cdots + A_{1j}b_j + \cdots + A_{1n}b_n = C_1 \\ A_{21} + A_{22}b_2 + \cdots + A_{2j}b_j + \cdots + A_{2n}b_n = C_2 \\ \vdots \\ A_{j1} + A_{j2}b_2 + \cdots + A_{jj}b_j + \cdots + A_{jn}b_n = C_j \\ \vdots \\ A_{n1} + A_{n2}b_2 + \cdots + A_{nj}b_j + \cdots + A_{nn}b_n = C_n \end{cases}$$

- この中で j 行目の式だけは右辺の C_j が未知量であり, C_j は通常の未知量 $b_i (i = 1 \sim j-1, j+1 \sim n)$

1 ~ n) がすべて求められた後に,

$$C_j = A_{j1}b_1 + A_{j2}b_2 + \cdots + A_{jj}b_j + \cdots + A_{jn}b_n$$

により求められる. そのため他の行の式とは性質が異なるので, $b_i (i = 1 \sim j - 1, j + 1 \sim n)$ を求めるプロセスからは除外する.

境界条件処理 5

- 即ち j 行目を抜いた $n - 1$ 個の式を考える.

$$\left\{ \begin{array}{l} A_{11} + A_{12}b_2 + \cdots + A_{1j}b_j + \cdots + A_{1n}b_n = C_1 \\ A_{21} + A_{22}b_2 + \cdots + A_{2j}b_j + \cdots + A_{2n}b_n = C_2 \\ \vdots \\ A_{j-1\ 1} + A_{j-1\ 2}b_2 + \cdots + A_{j-1\ j}b_j + \cdots + A_{j-1\ n}b_n = C_{j-1} \\ A_{j+1\ 1} + A_{j+1\ 2}b_2 + \cdots + A_{j+1\ j}b_j + \cdots + A_{j+1\ n}b_n = C_{j+1} \\ \vdots \\ A_{n1} + A_{n2}b_2 + \cdots + A_{nj}b_j + \cdots + A_{nn}b_n = C_n \end{array} \right.$$

- この式中の $A_{1j}b_j, A_{2j}b_j, \dots, A_{nj}b_j$ は既知量なので右辺に移項する.

$$\left\{ \begin{array}{l} A_{11} + A_{12}b_2 + \cdots + A_{1\ j-1}b_{j-1} + A_{1\ j+1}b_{j+1} + \cdots + A_{1n}b_n = C_1 - A_{1j}b_j \\ A_{21} + A_{22}b_2 + \cdots + A_{2\ j-1}b_{j-1} + A_{2\ j+1}b_{j+1} + \cdots + A_{2n}b_n = C_2 - A_{2j}b_j \\ \vdots \\ A_{j-1\ 1} + A_{j-1\ 2}b_2 + \cdots + A_{j-1\ j-1}b_{j-1} + A_{j-1\ j+1}b_{j+1} + \cdots + A_{j-1\ n}b_n = C_{j-1} - A_{j-1\ j}b_j \\ A_{j+1\ 1} + A_{j+1\ 2}b_2 + \cdots + A_{j+1\ j-1}b_{j-1} + A_{j+1\ j+1}b_{j+1} + \cdots + A_{j+1\ n}b_n = C_{j+1} - A_{j+1\ j}b_j \\ \vdots \\ A_{n1} + A_{n2}b_2 + \cdots + A_{n\ j-1}b_{j-1} + A_{n\ j+1}b_{j+1} + \cdots + A_{nn}b_n = C_n - A_{nj}b_j \end{array} \right.$$

境界条件処理 6

- これをあらためてマトリックス表示すると, 以下のようになる.
- 即ち係数マトリックスは, j 行と j 列をとり除いたもの
- 未知ベクトルは j 行目をとり除いたもの
- 右辺は, もとの左辺からもとの係数マトリックスの j 列目の b_j 倍をひいたものの j 行目をとり除いたもの

$$\begin{bmatrix} A_{11} & \dots & A_{1j-1} & A_{1j+1} & \dots & A_{1n} \\ A_{21} & \dots & A_{2j-1} & A_{2j+1} & \dots & A_{2n} \\ \vdots & & & & & \\ A_{j-11} & \dots & A_{j-1j-1} & A_{j+1j+1} & \dots & A_{j-1n} \\ A_{j+11} & \dots & A_{j+1j+1} & A_{j+1j+1} & \dots & A_{j+1n} \\ \vdots & & & & & \\ A_{n1} & \dots & A_{nj-1} & A_{nj+1} & \dots & A_{nn} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_{j-1} \\ b_{j+1} \\ \vdots \\ b_n \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} C_1 \\ C_2 \\ \vdots \\ C_{j-1} \\ C_{j+1} \\ \vdots \\ C_n \end{Bmatrix} - b_j \begin{Bmatrix} A_{1j} \\ A_{2j} \\ \vdots \\ A_{j-1j} \\ A_{j+1j} \\ \vdots \\ A_{nj} \end{Bmatrix}$$

- b_j が 0 であれば右辺第 2 項は消滅する.
- 以上の操作は, 既知の b_j が複数になっても同様である. $b_{j(1)}, b_{j(2)}, \dots, b_{j(m)}$ が既知であるとする. まず連立一次方程式から $j(1), j(2), \dots, j(m)$ 行目の方程式を除外する. 次に左辺の $b_{j(1)}, b_{j(2)}, \dots, b_{j(m)}$ を含んだ項を右辺に移項する. これをマトリックス表示すればよい.

Gauss の消去法小テスト

マトリックス $[A]$ を Gauss の消去法に従って三角分解すると，以下のようになる．三角分解の過程を示せ．

学籍番号 _____

氏名 _____

$$[A] = \begin{bmatrix} 4 & -3 & 1 & 0 \\ -3 & 5 & -3 & 1 \\ 1 & -3 & 5 & -3 \\ 0 & 1 & -3 & 4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4 & -3 & 1 & 0 \\ -3 & 5 & -3 & 1 \\ 1 & -3 & 5 & -3 \\ 0 & 1 & -3 & 4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{3}{4} & 1 & 0 & 0 \\ \frac{1}{4} & -\frac{9}{11} & 1 & 0 \\ 0 & \frac{4}{11} & -\frac{3}{4} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 4 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{11}{4} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{32}{11} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & -\frac{3}{4} & \frac{1}{4} & 0 \\ 0 & 1 & -\frac{9}{11} & \frac{4}{11} \\ 0 & 0 & 1 & -\frac{3}{4} \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$