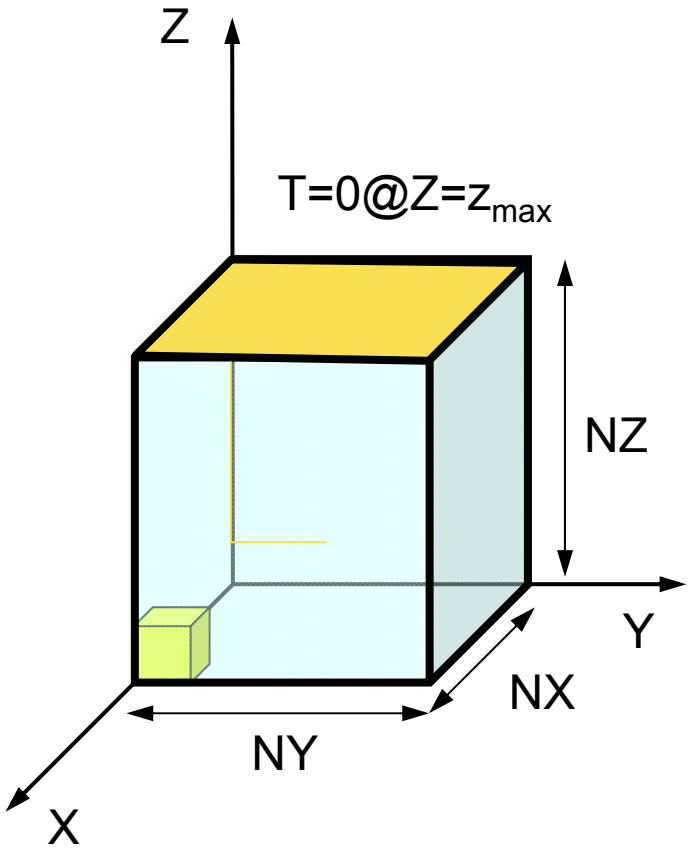
有限要素法による
三次元定常熱伝導解析プログラム
Fortran編

中島 研吾
東京大学情報基盤センター

対象とする問題：三次元定常熱伝導

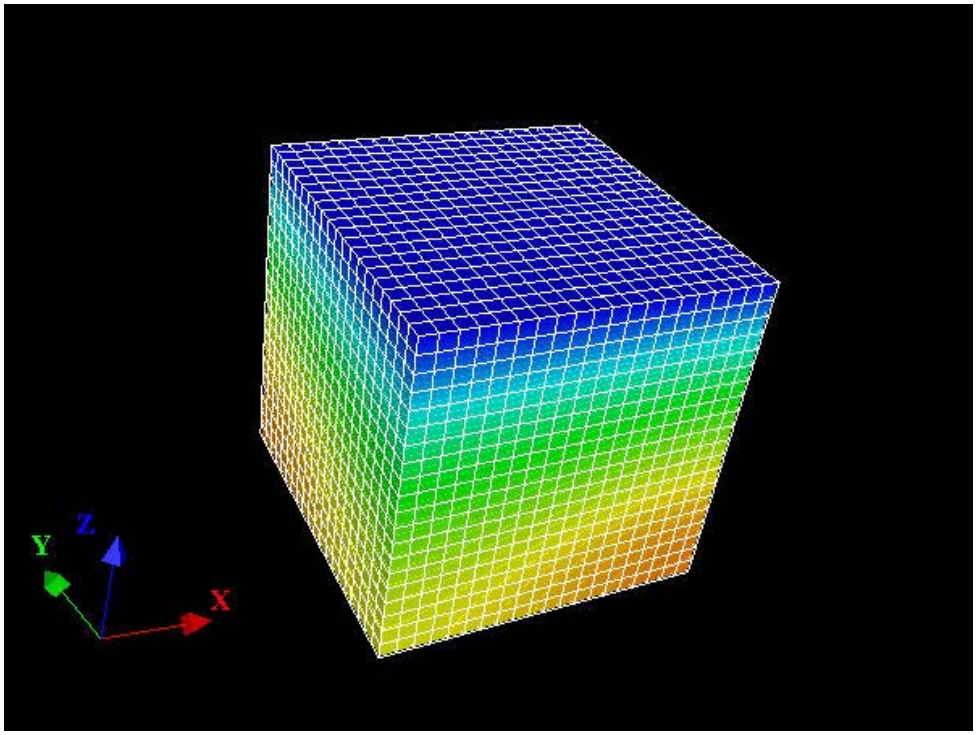
$$\frac{\partial}{\partial x}\left(\lambda\frac{\partial T}{\partial x}\right)+\frac{\partial}{\partial y}\left(\lambda\frac{\partial T}{\partial y}\right)+\frac{\partial}{\partial z}\left(\lambda\frac{\partial T}{\partial z}\right)+\dot{Q}(x,y,z)=0$$



- 定常熱伝導＋発熱
- 一様な熱伝導率 λ
- 直方体
  - 一辺長さ1の立方体（六面体）要素
  - 各方向にNX・NY・NZ個
- 境界条件
  - T=0@Z=z_{max}
- 体積当たり発熱量は位置（メッシュの中心の座標 x_c,y_c）に依存
  - $\dot{Q}(x,y,z)=QVOL|x_C+y_C|$

対象とする問題：三次元定常熱伝導

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



movie

- 原点から遠い部分が高温
- 体積当たり発熱量は位置（メッシュの中心の座標）に依存
  - $\dot{Q}(x,y,z)=\left|x_C+y_C\right|$

有限要素法の処理

- 支配方程式
- ガラーキン法：弱形式
- 要素単位の積分
  - 要素マトリクス生成
- 全体マトリクス生成
- 境界条件適用
- 連立一次方程式

有限要素法の処理：プログラム

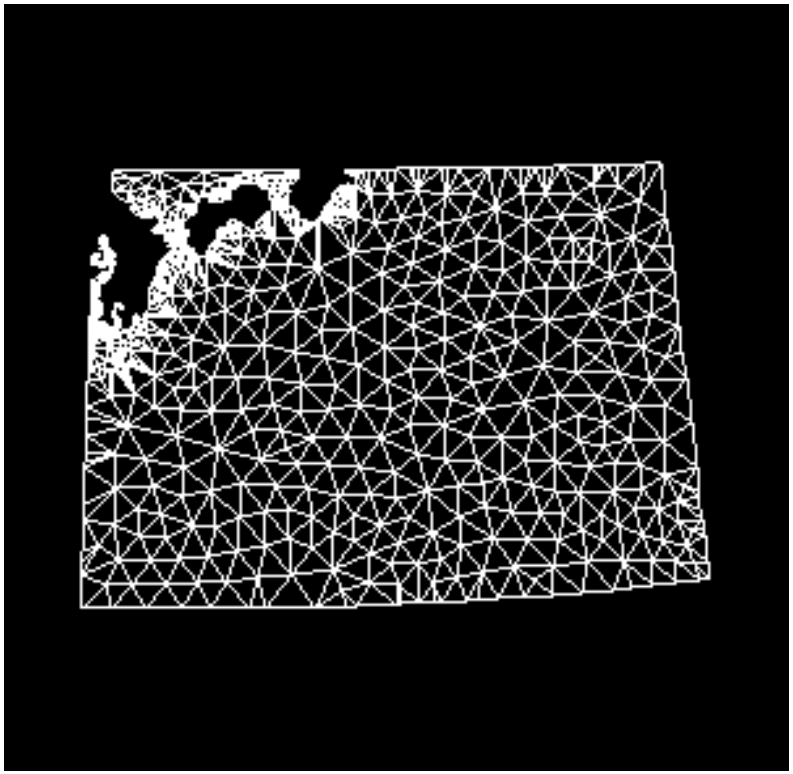
- 初期化
  - 制御変数読み込み
  - 座標読み込み⇒要素生成（N:節点数，ICELTOT：要素数）
  - 配列初期化（全体マトリクス，要素マトリクス）
  - 要素⇒全体マトリクスマッピング（Index，Item）
- マトリクス生成
  - 要素単位の処理（do icel= 1, ICELTOT）
    - 要素マトリクス計算
    - 全体マトリクスへの重ね合わせ
  - 境界条件の処理
- 連立一次方程式
  - 共役勾配法（CG）

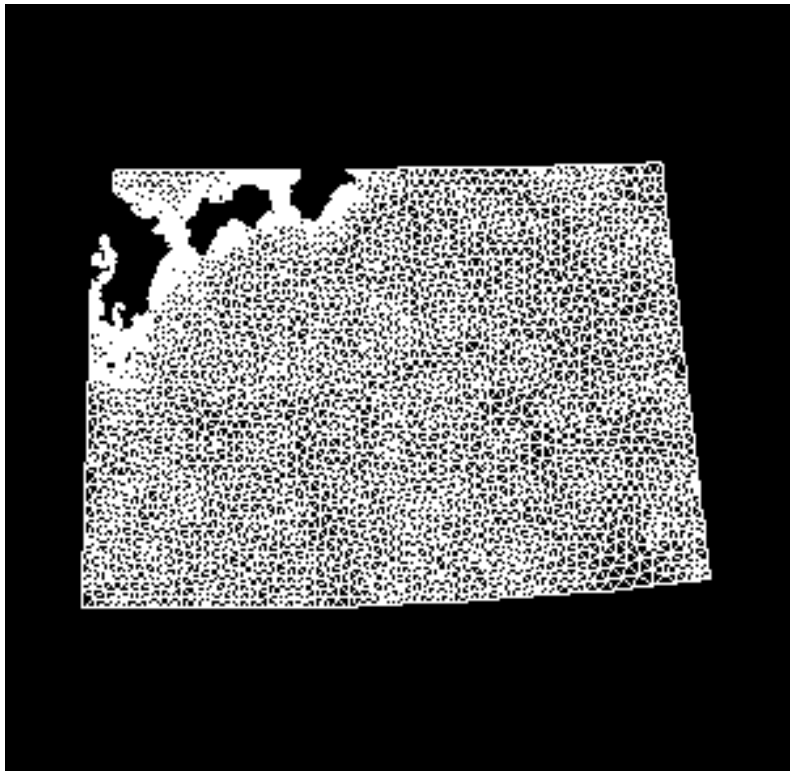
- 三次元要素の定式化
- 三次元熱伝導方程式
  - ガラーキン法
  - 要素マトリクス生成

- プログラムの実行
- データ構造
- プログラムの構成

二次元への拡張：三角形要素

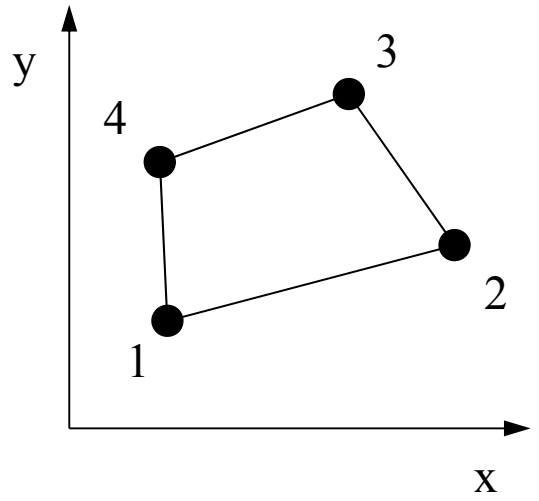
- 任意の形状を扱うことができる。
- 特に一次要素は精度が悪く，一部の問題を除いてあまり使用されない。





二次元への拡張：四角形要素

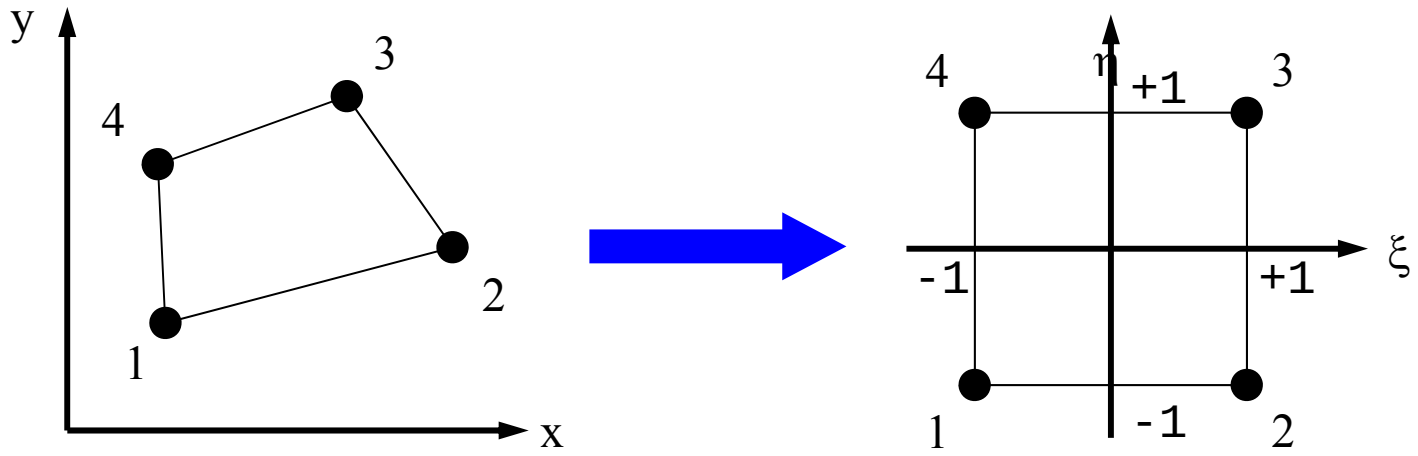
- 一次元要素と同じ形状関数をx,y軸に適用することによって，四角形要素の定式化は可能である。
  - 三角形と比較して特に低次要素の精度はよい
- しかしながら，各辺が座標軸に平行な長方形でなければならない
  - 差分法と変わらない



- このような形状を扱うことができない。

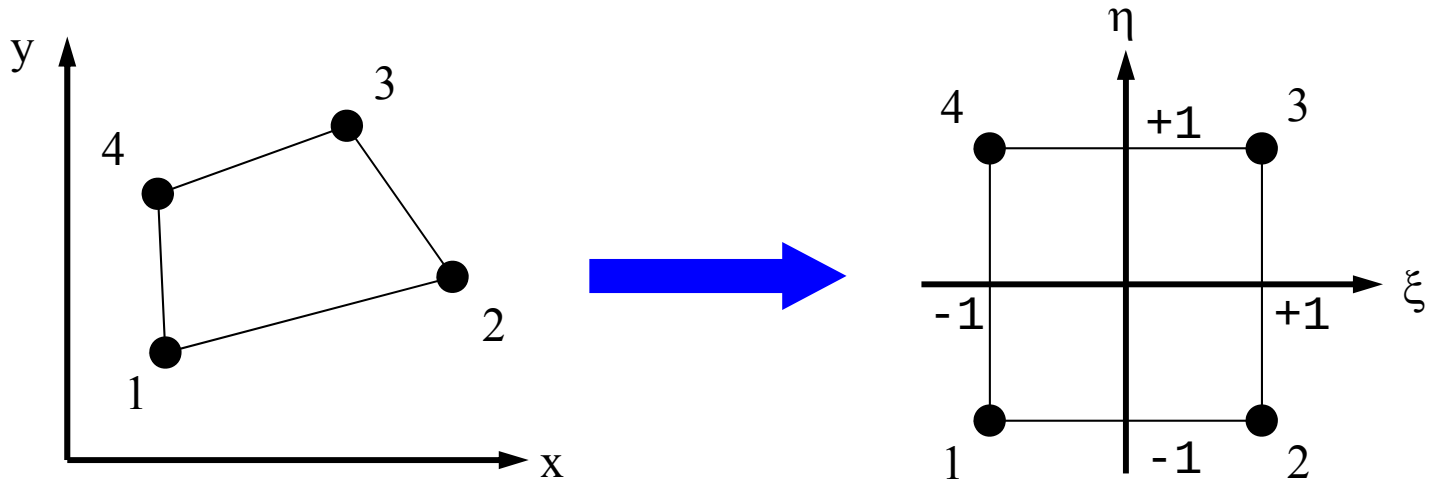
アイソパラメトリック要素（1/3）

- 各要素を，自然座標系（ξ,η）の正方形要素[±1, ±1] に変換する。



- 各要素の全体座標系（global coordinate）（x,y）における座標成分を，自然座標系における形状関数[N]（従属変数の内挿に使うのと同じ[N]）を使用して変換する場合，このような要素をアイソパラメトリック要素（isoparametric element）という

アイソパラメトリック要素（2/3）

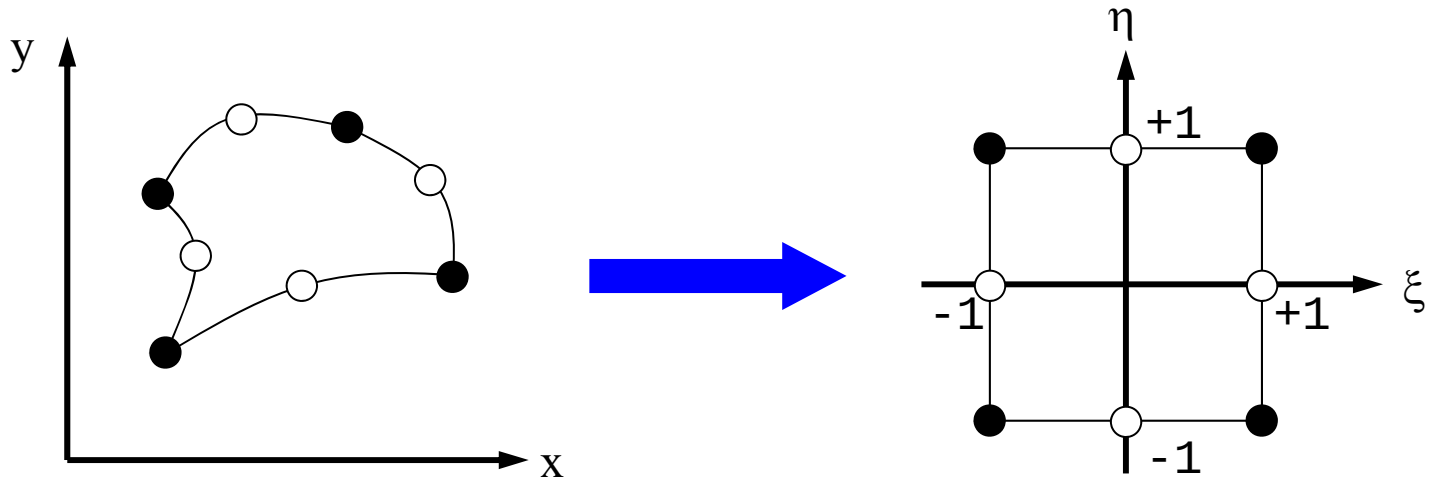


- 各節点の座標：(x_1,y_1), (x_2,y_2), (x_3,y_3), (x_4,y_4)
- 各節点における温度：T_1, T_2, T_3, T_4

$$T = \sum_{i=1}^{4} N_i(\xi,\eta)\cdot T_i$$

$$x = \sum_{i=1}^{4} N_i(\xi,\eta)\cdot x_i,\ y = \sum_{i=1}^{4} N_i(\xi,\eta)\cdot y_i$$

アイソパラメトリック要素（3/3）

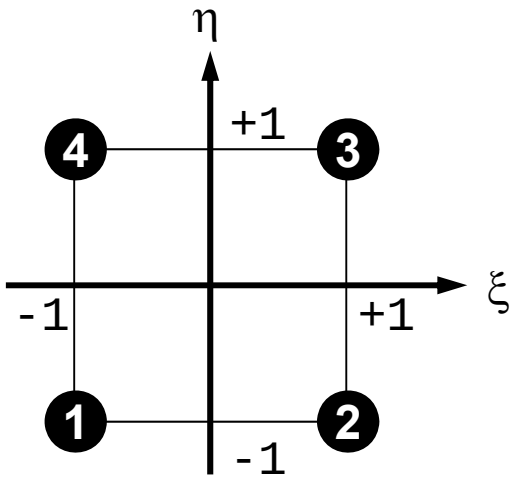


- 高次の補間関数を使えば，曲線，曲面も扱うことが可能となる。
- そういう意味で「自然座標系」と呼んでいる。

Sub-Parametric
Super-Parametric

2D自然座標系の形状関数（1/3）

- 自然座標系における正方形上の内挿多項式は下式で与えられる：



$$T = \alpha_1 + \alpha_2 \xi + \alpha_3 \eta + \alpha_4 \xi \eta$$

- 各節点での条件より：

$$\alpha_1 = \frac{T_1 + T_2 + T_3 + T_4}{4}, \quad \alpha_2 = \frac{-T_1 + T_2 + T_3 - T_4}{4},$$

$$\alpha_3 = \frac{-T_1 - T_2 + T_3 + T_4}{4}, \quad \alpha_4 = \frac{T_1 - T_2 + T_3 - T_4}{4}$$

2D自然座標系の形状関数（2/3）

$$T = \alpha_1 + \alpha_2\xi + \alpha_3\eta + \alpha_4\xi\eta$$

$$= \frac{T_1+T_2+T_3+T_4}{4} + \frac{-T_1+T_2+T_3-T_4}{4}\xi +$$

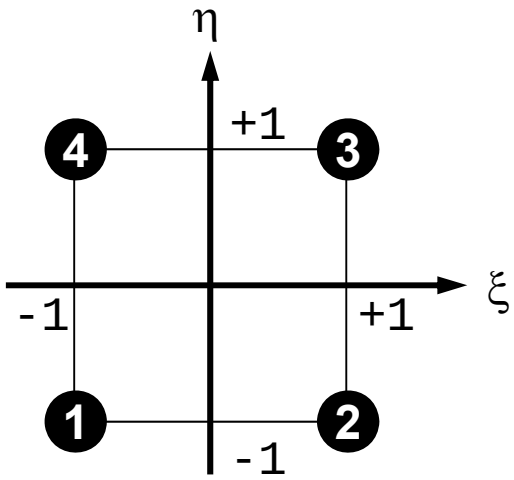
$$\frac{-T_1-T_2+T_3+T_4}{4}\eta + \frac{T_1-T_2+T_3-T_4}{4}\xi\eta$$

$$= \frac{1}{4}(1-\xi-\eta+\xi\eta)T_1 + \frac{1}{4}(1+\xi-\eta-\xi\eta)T_2 +$$

$$\frac{1}{4}(1+\xi+\eta+\xi\eta)T_3 + \frac{1}{4}(1-\xi+\eta-\xi\eta)T_4$$

$$= \underbrace{\frac{1}{4}(1-\xi)(1-\eta)}_{N_1}T_1 + \underbrace{\frac{1}{4}(1+\xi)(1-\eta)}_{N_2}T_2 +$$

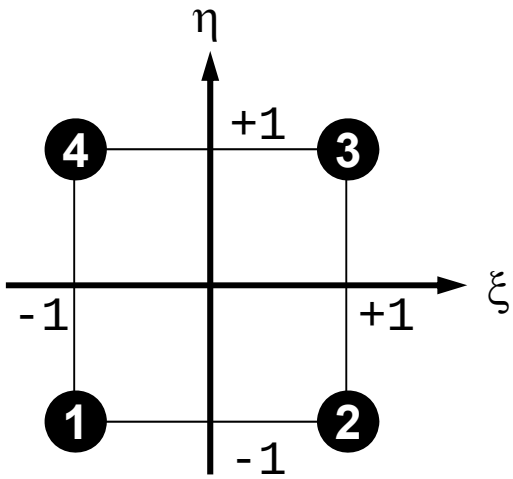
$$\underbrace{\frac{1}{4}(1+\xi)(1+\eta)}_{N_3}T_3 + \underbrace{\frac{1}{4}(1-\xi)(1+\eta)}_{N_4}T_4$$



2D自然座標系の形状関数（3/3）

- 元の式に代入して，T_iについて整理すると以下のようになる：

$$T = N_1 T_1 + N_2 T_2 + N_3 T_3 + N_4 T_4$$



- 形状関数N_iは以下のようになる：

$$N_1(\xi,\eta) = \frac{1}{4}(1-\xi)(1-\eta), \quad N_2(\xi,\eta) = \frac{1}{4}(1+\xi)(1-\eta),$$

$$N_3(\xi,\eta) = \frac{1}{4}(1+\xi)(1+\eta), \quad N_4(\xi,\eta) = \frac{1}{4}(1-\xi)(1+\eta)$$

- 双一次（bi-linear）要素とも呼ばれる。
- 各節点におけるN_iの値を計算してみよ

三次元への拡張

- 四面体要素：二次元における三角形要素
  - 任意の形状を扱うことができる。
  - 特に一次要素は精度が悪く，一部の問題を除いてあまり使用されない。
  - 高次の四面体要素は広く使用されている・・・

- 本講義では低次六面体要素（アイソパラメトリック要素）を使用する。
  - tri-linear
- 自由度：温度@各節点上

3D自然座標系の形状関数

$$N_1(\xi,\eta,\zeta)=\frac{1}{8}(1-\xi)(1-\eta)(1-\zeta) \qquad N_5(\xi,\eta,\zeta)=\frac{1}{8}(1-\xi)(1-\eta)(1+\zeta)$$

$$N_2(\xi,\eta,\zeta)=\frac{1}{8}(1+\xi)(1-\eta)(1-\zeta) \qquad N_6(\xi,\eta,\zeta)=\frac{1}{8}(1+\xi)(1-\eta)(1+\zeta)$$

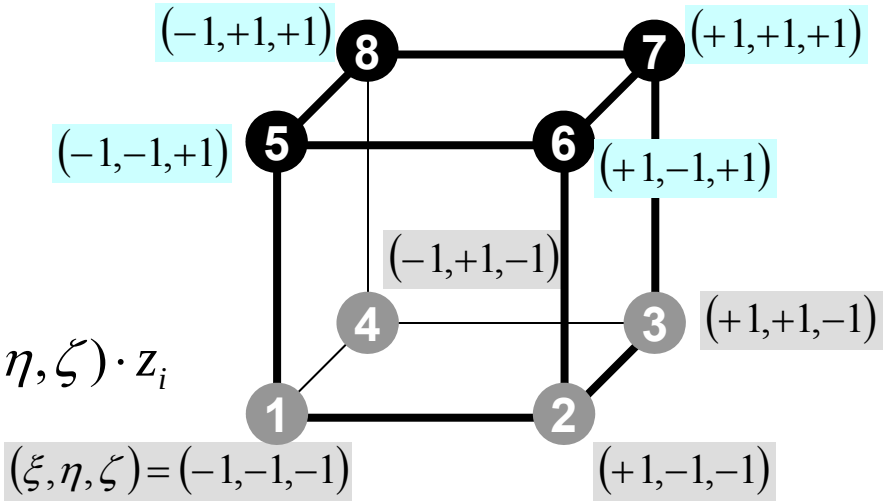
$$N_3(\xi,\eta,\zeta)=\frac{1}{8}(1+\xi)(1+\eta)(1-\zeta) \qquad N_7(\xi,\eta,\zeta)=\frac{1}{8}(1+\xi)(1+\eta)(1+\zeta)$$

$$N_4(\xi,\eta,\zeta)=\frac{1}{8}(1-\xi)(1+\eta)(1-\zeta) \qquad N_8(\xi,\eta,\zeta)=\frac{1}{8}(1-\xi)(1+\eta)(1+\zeta)$$

$$T=\sum_{i=1}^{8}N_i(\xi,\eta,\zeta)\cdot T_i$$

$$x=\sum_{i=1}^{8}N_i(\xi,\eta,\zeta)\cdot x_i$$

$$y=\sum_{i=1}^{8}N_i(\xi,\eta,\zeta)\cdot y_i, \quad z=\sum_{i=1}^{8}N_i(\xi,\eta,\zeta)\cdot z_i$$



- 三次元要素の定式化
- 三次元熱伝導方程式
  - ガラーキン法
  - 要素マトリクス生成

- プログラムの実行
- データ構造
- プログラムの構成

ガラーキン法の適用（1/3）

- 以下のような三次元熱伝導方程式を考慮する（熱伝導率一定）：

$$\left(\lambda\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}\right)+\left(\lambda\frac{\partial^2 T}{\partial y^2}\right)+\left(\lambda\frac{\partial^2 T}{\partial z^2}\right)+\dot{Q}=0$$

$T=[N]\{\phi\}$ 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：

$$\int_V [N]^T\left\{\lambda\left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}\right)+\lambda\left(\frac{\partial^2 T}{\partial y^2}\right)+\lambda\left(\frac{\partial^2 T}{\partial z^2}\right)+\dot{Q}\right\}dV=0$$

ガラーキン法の適用（2/3）

- 三次元のグリーンの定理

$$\int_V A\left(\frac{\partial^2 B}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 B}{\partial y^2}+\frac{\partial^2 B}{\partial z^2}\right)dV=\int_S A\frac{\partial B}{\partial n}\,dS-\int_V\left(\frac{\partial A}{\partial x}\frac{\partial B}{\partial x}+\frac{\partial A}{\partial y}\frac{\partial B}{\partial y}+\frac{\partial A}{\partial z}\frac{\partial B}{\partial z}\right)dV$$

- 前式の2階微分の部分に適用（表面積分省略）：

$$\int_V [N]^T\left\{\lambda\left(T_{,xx}\right)+\lambda\left(T_{,yy}\right)+\lambda\left(T_{,zz}\right)\right\}dV$$

$$=-\int_V\left\{\lambda\left(\left[N_{,x}\right]^T T_{,x}\right)+\lambda\left(\left[N_{,y}\right]^T T_{,y}\right)+\lambda\left(\left[N_{,z}\right]^T T_{,z}\right)\right\}dV$$

- これに以下を代入する：

$$T=[N]\{\phi\},\quad T_{,x}=\left[N_{,x}\right]\{\phi\},\quad T_{,y}=\left[N_{,y}\right]\{\phi\},\quad T_{,z}=\left[N_{,z}\right]\{\phi\}$$

ガラーキン法の適用（3/3）

- 体積あたり発熱量の項 $\dot{Q}$ を加えて次式が得られる：

$$-\int_V \left\{\lambda\left([N_{,x}]^T[N_{,x}]\right)+\lambda\left([N_{,y}]^T[N_{,y}]\right)+\lambda\left([N_{,z}]^T[N_{,z}]\right)\right\}dV\cdot\{\phi\}+\int_V \dot{Q}[N]dV=0$$

- 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。
  - 項が増えただけで，一次元と同じ

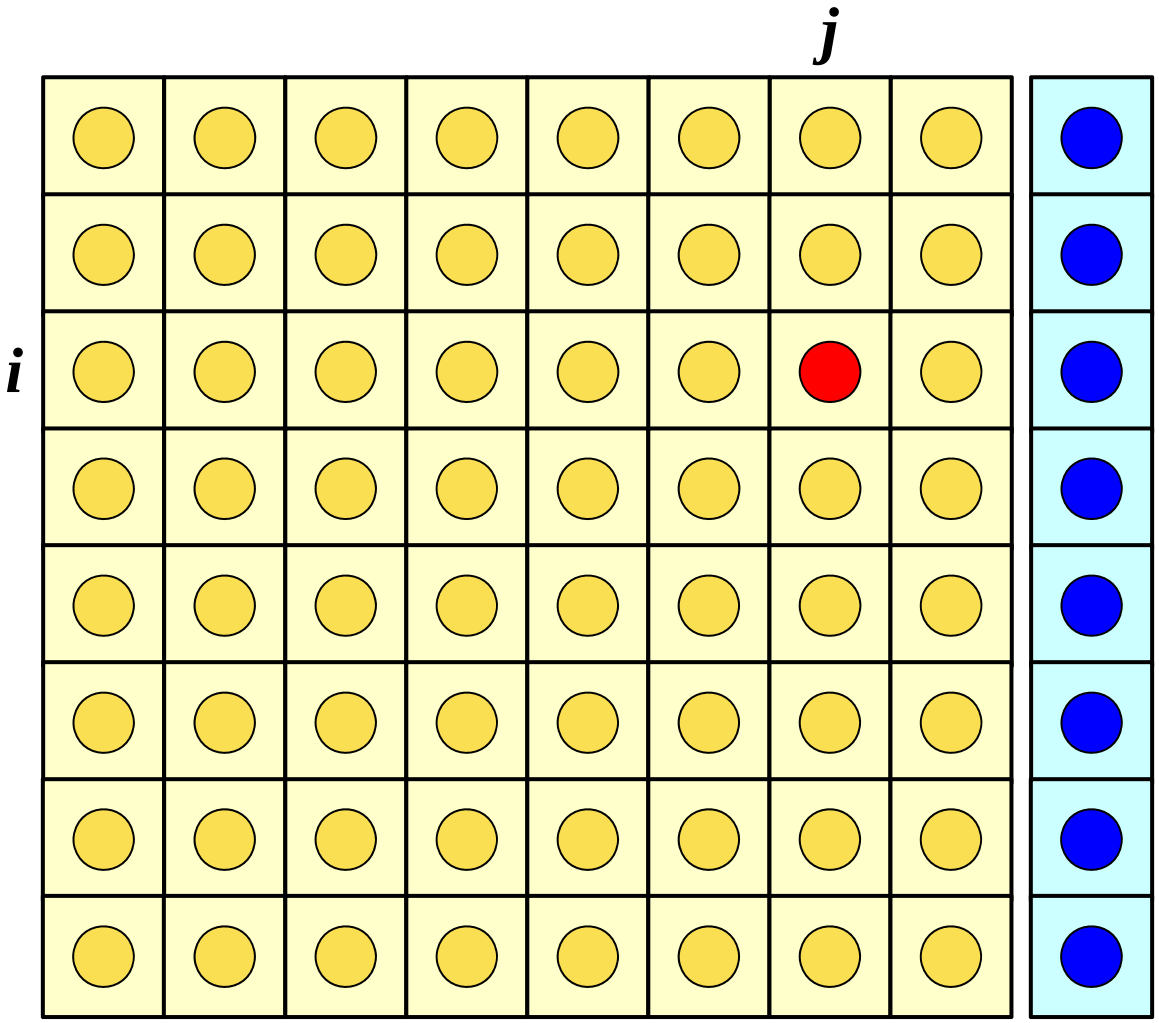
境界条件を考慮した弱形式：各要素

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

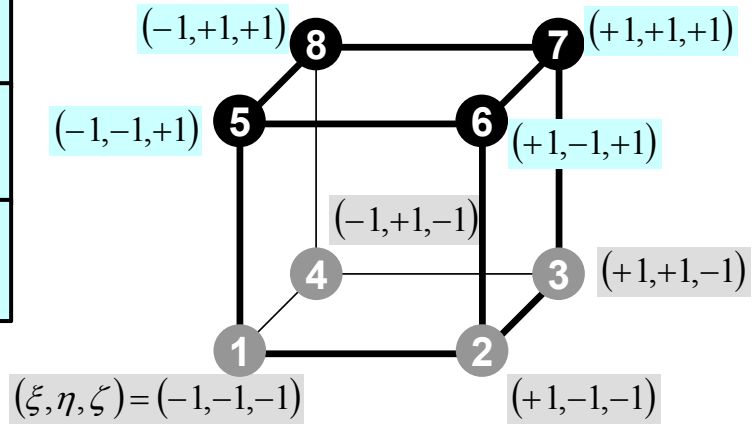
$$[k]^{(e)} = \int_V \lambda\left([N_{,x}]^T[N_{,x}]\right)dV + \int_V \lambda\left([N_{,y}]^T[N_{,y}]\right)dV + \int_V \lambda\left([N_{,z}]^T[N_{,z}]\right)dV$$

$$[f]^{(e)} = \int_V \dot{Q}[N]^T dV$$

要素マトリクス：8×8行列

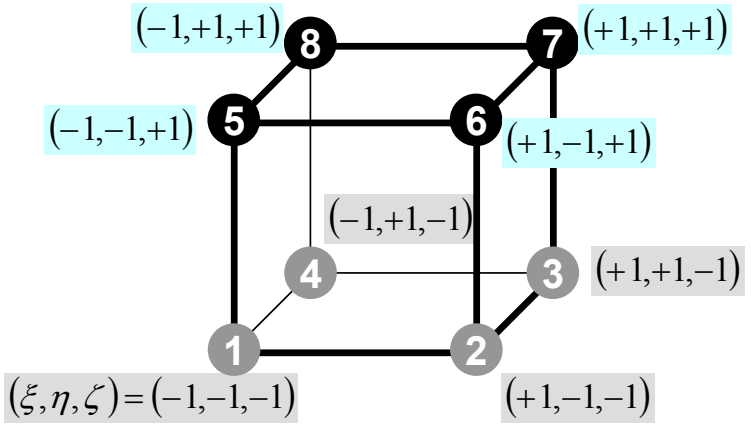


$$\lfloor k_{ij} \rfloor \quad (i, j = 1 \ldots 8)$$



要素マトリクス：k_{ij}

$$\left[k_{ij}\right] \quad (i, j = 1 \ldots 8)$$



$$[k]^{(e)} = \int_V \lambda\left([N_{,x}]^T [N_{,x}]\right)dV + \int_V \lambda\left([N_{,y}]^T [N_{,y}]\right)dV + \int_V \lambda\left([N_{,z}]^T [N_{,z}]\right)dV$$

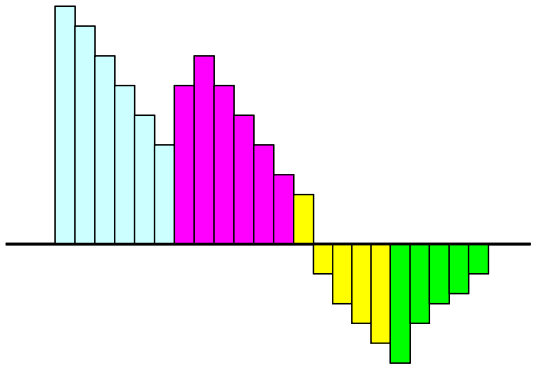
$$k_{ij} = -\int_V \left\{\lambda \cdot N_{i,x} \cdot N_{j,x} + \lambda \cdot N_{i,y} \cdot N_{j,y} + \lambda \cdot N_{i,z} \cdot N_{j,z}\right\}dV$$

数値的に積分を実施する方法

- 台形公式
- シンプソンの公式
- ガウスの積分公式（ガウス＝ルジャンドル（Gauss-Legendre）とも呼ばれる，精度良い）

- 不定積分を解析的に求めるのではなく，有限な数のサンプル点における値を利用する

$$\int_{X_1}^{X_2} f(x)dx \Rightarrow \sum_{k=1}^{m} [w_k \cdot f(x_k)]$$



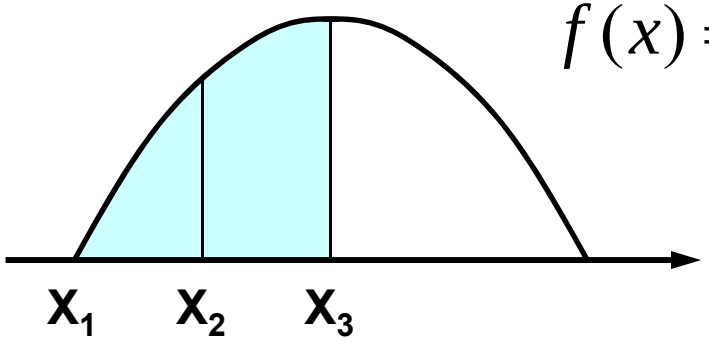
ガウス積分公式：一次元の例

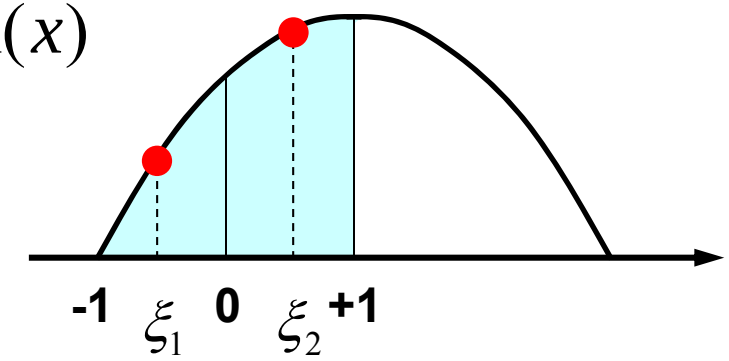
シンプソンの公式より精度良い

Simpson's

Gauss

$$f(x) = \sin(x)$$





$$X_1 = 0, \quad X_2 = \frac{\pi}{4}, \quad X_3 = \frac{\pi}{2}$$

$$h = X_2 - X_1 = X_3 - X_1 = \frac{\pi}{4}$$

$$S = \frac{h}{3}\left[f(X_1) + 4f(X_2) + f(X_3)\right] = 1.0023$$

$$\xi_1, \xi_2 = \pm 0.5773502692$$

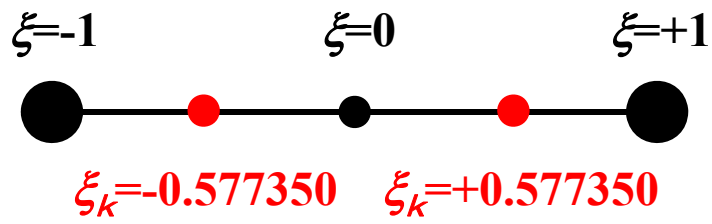
$$S = \int_0^{\pi/2} f(x)dx = \int_{-1}^{+1} f(\xi)\, h\, d\xi$$

$$\cong h\sum_{k=1}^{2} W_k \cdot f(\xi_k) = 0.99847$$

ガウスの積分公式

- 無次元化された自然座標系 [-1,+1] を対象とする。
- m個の積分点を使用すると（2m-1）次の関数までは近似可能（従って1次，2次の内挿関数（形状関数）を使用するときは，m=2で十分）

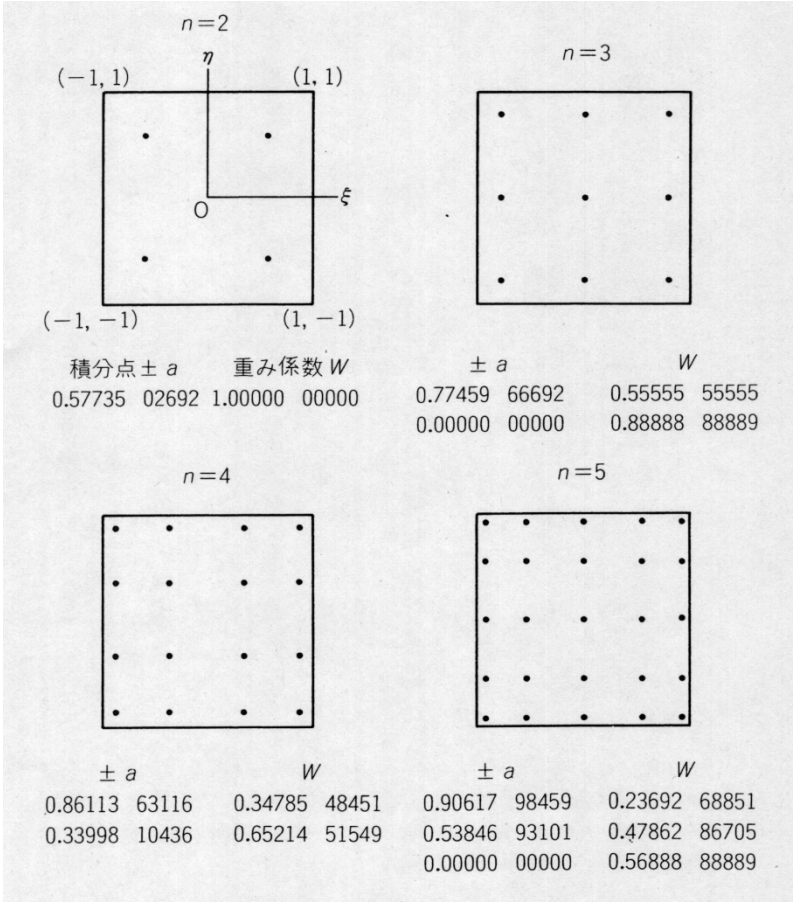
$$\int_{-1}^{+1} f(\xi)d\xi = \sum_{k=1}^{m}[w_k \cdot f(\xi_k)]$$



$$m=1 \quad \xi_k = 0.00,\ w_k = 2.00$$
$$m=2 \quad \xi_k = \pm 0.577350,\ w_k = 1.00$$
$$m=3 \quad \xi_k = 0.00,\ w_k = 8/9$$
$$\xi_k = \pm 0.774597,\ w_k = 5/9$$

Gaussian Quadrature
ガウスの積分公式

- 自然座標系（ξ,η,ζ）上で定義⇒ガウス積分公式が使える（三次元）



$$I=\int_{-1}^{+1}\int_{-1}^{+1}\int_{-1}^{+1} f(\xi,\eta,\zeta)\,d\xi d\eta d\zeta$$

$$=\sum_{i=1}^{L}\sum_{j=1}^{M}\sum_{k=1}^{N}\left[W_i\cdot W_j\cdot W_k\cdot f(\xi_i,\eta_j,\zeta_k)\right]$$

L,M,N: ξ,η,ζ方向の積分点数

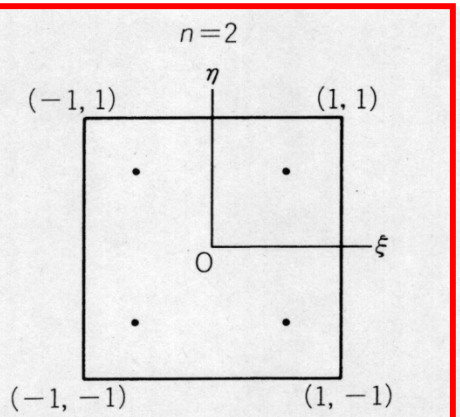
(ξ_i,η_j,ζ_k)：積分点の座標値

W_i,W_j,W_k：積分点での重み係数

Gaussian Quadrature
ガウスの積分公式

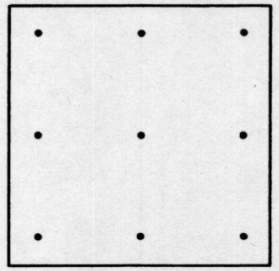
この組み合わせがよく使われる，二次元では4点におけるfの値を計算して足せば良い（三次元では8点）

$n=2$



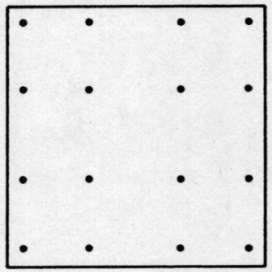
積分点 ± a	重み係数 W
0.57735 02692	1.00000 00000

$n=3$



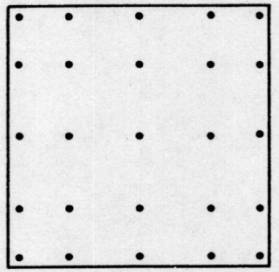
± a	W
0.77459 66692	0.55555 55555
0.00000 00000	0.88888 88889

$n=4$



± a	W
0.86113 63116	0.34785 48451
0.33998 10436	0.65214 51549

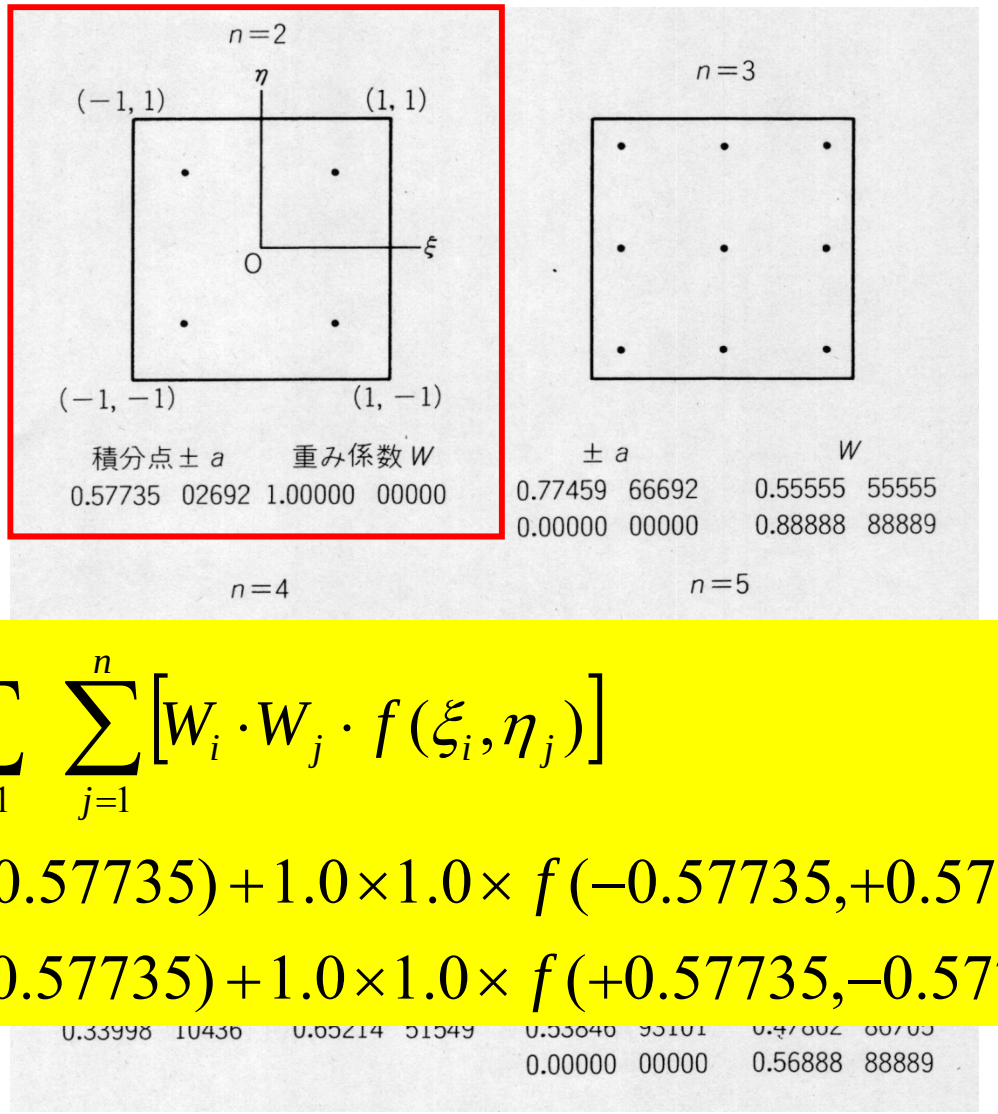
$n=5$



± a	W
0.90617 98459	0.23692 68851
0.53846 93101	0.47862 86705
0.00000 00000	0.56888 88889

Gaussian Quadrature
ガウスの積分公式

この組み合わせがよく使われる，二次元では4点におけるfの値を計算して足せば良い（三次元では8点）



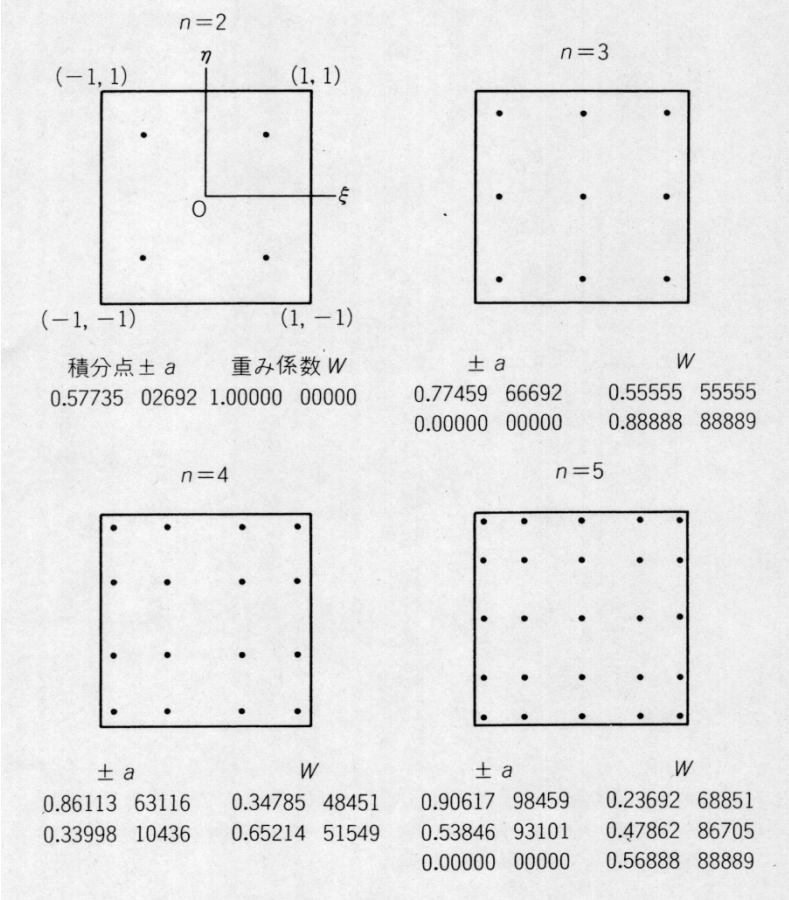
$$I=\int_{-1}^{+1}\int_{-1}^{+1} f(\xi,\eta)\,d\xi d\eta=\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n}\left[W_i\cdot W_j\cdot f(\xi_i,\eta_j)\right]$$

$$=1.0\times1.0\times f(-0.57735,-0.57735)+1.0\times1.0\times f(-0.57735,+0.57735)$$

$$+1.0\times1.0\times f(+0.57735,+0.57735)+1.0\times1.0\times f(+0.57735,-0.57735)$$

あとは積分を求めれば良い

- 自然座標系（ξ,η,ζ）上で定義⇒ガウス積分公式が使える（三次元）・・・しかし，微分が



$$I=\int_{-1}^{+1}\int_{-1}^{+1}\int_{-1}^{+1} f(\xi,\eta,\zeta)\,d\xi d\eta d\zeta$$

$$=\sum_{i=1}^{L}\sum_{j=1}^{M}\sum_{k=1}^{N}\left[W_i\cdot W_j\cdot W_k\cdot f(\xi_i,\eta_j,\zeta_k)\right]$$

L,M,N: ξ,η,ζ方向の積分点数

(ξ_i,η_j,ζ_k)：積分点の座標値

W_i,W_j,W_k：積分点での重み係数

自然座標系における偏微分（1/4）

- 偏微分の公式より以下のようになる：

$$\frac{\partial N_i(\xi,\eta,\zeta)}{\partial \xi} = \frac{\partial N_i}{\partial x}\frac{\partial x}{\partial \xi} + \frac{\partial N_i}{\partial y}\frac{\partial y}{\partial \xi} + \frac{\partial N_i}{\partial z}\frac{\partial z}{\partial \xi}$$

$$\frac{\partial N_i(\xi,\eta,\zeta)}{\partial \eta} = \frac{\partial N_i}{\partial x}\frac{\partial x}{\partial \eta} + \frac{\partial N_i}{\partial y}\frac{\partial y}{\partial \eta} + \frac{\partial N_i}{\partial z}\frac{\partial z}{\partial \eta}$$

$$\frac{\partial N_i(\xi,\eta,\zeta)}{\partial \zeta} = \frac{\partial N_i}{\partial x}\frac{\partial x}{\partial \zeta} + \frac{\partial N_i}{\partial y}\frac{\partial y}{\partial \zeta} + \frac{\partial N_i}{\partial z}\frac{\partial z}{\partial \zeta}$$

$\left[\frac{\partial N_i}{\partial \xi}, \frac{\partial N_i}{\partial \eta}, \frac{\partial N_i}{\partial \zeta}\right]$ は定義より簡単に求められるが

$\left[\frac{\partial N_i}{\partial x}, \frac{\partial N_i}{\partial y}, \frac{\partial N_i}{\partial z}\right]$ を実際の計算で使用する

自然座標系における偏微分（2/4）

- マトリックス表示すると：

$$\begin{Bmatrix} \frac{\partial N_i}{\partial \xi} \\ \frac{\partial N_i}{\partial \eta} \\ \frac{\partial N_i}{\partial \zeta} \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial x}{\partial \xi} & \frac{\partial y}{\partial \xi} & \frac{\partial z}{\partial \xi} \\ \frac{\partial x}{\partial \eta} & \frac{\partial y}{\partial \eta} & \frac{\partial z}{\partial \eta} \\ \frac{\partial x}{\partial \zeta} & \frac{\partial y}{\partial \zeta} & \frac{\partial z}{\partial \zeta} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \frac{\partial N_i}{\partial x} \\ \frac{\partial N_i}{\partial y} \\ \frac{\partial N_i}{\partial z} \end{Bmatrix} = [J] \begin{Bmatrix} \frac{\partial N_i}{\partial x} \\ \frac{\partial N_i}{\partial y} \\ \frac{\partial N_i}{\partial z} \end{Bmatrix}$$

$[J]$: ヤコビのマトリクス
（Jacobi matrix
Jacobian）

自然座標系における偏微分（3/4）

- N_iの定義より簡単に求められる

$$J_{11}=\frac{\partial x}{\partial \xi}=\frac{\partial}{\partial \xi}\left(\sum_{i=1}^{8}N_i x_i\right)=\sum_{i=1}^{8}\frac{\partial N_i}{\partial \xi}x_i,\quad J_{12}=\frac{\partial y}{\partial \xi}=\frac{\partial}{\partial \xi}\left(\sum_{i=1}^{8}N_i y_i\right)=\sum_{i=1}^{8}\frac{\partial N_i}{\partial \xi}y_i,$$

$$J_{13}=\frac{\partial z}{\partial \xi}=\frac{\partial}{\partial \xi}\left(\sum_{i=1}^{8}N_i z_i\right)=\sum_{i=1}^{8}\frac{\partial N_i}{\partial \xi}z_i$$

$$J_{21}=\frac{\partial x}{\partial \eta}=\frac{\partial}{\partial \eta}\left(\sum_{i=1}^{8}N_i x_i\right)=\sum_{i=1}^{8}\frac{\partial N_i}{\partial \eta}x_i,\quad J_{22}=\frac{\partial y}{\partial \eta}=\frac{\partial}{\partial \eta}\left(\sum_{i=1}^{8}N_i y_i\right)=\sum_{i=1}^{8}\frac{\partial N_i}{\partial \eta}y_i,$$

$$J_{23}=\frac{\partial z}{\partial \eta}=\frac{\partial}{\partial \eta}\left(\sum_{i=1}^{8}N_i z_i\right)=\sum_{i=1}^{8}\frac{\partial N_i}{\partial \eta}z_i$$

$$J_{31}=\frac{\partial x}{\partial \zeta}=\frac{\partial}{\partial \zeta}\left(\sum_{i=1}^{8}N_i x_i\right)=\sum_{i=1}^{8}\frac{\partial N_i}{\partial \zeta}x_i,\quad J_{32}=\frac{\partial y}{\partial \zeta}=\frac{\partial}{\partial \zeta}\left(\sum_{i=1}^{8}N_i y_i\right)=\sum_{i=1}^{8}\frac{\partial N_i}{\partial \zeta}y_i,$$

$$J_{33}=\frac{\partial z}{\partial \zeta}=\frac{\partial}{\partial \zeta}\left(\sum_{i=1}^{8}N_i z_i\right)=\sum_{i=1}^{8}\frac{\partial N_i}{\partial \zeta}z_i$$

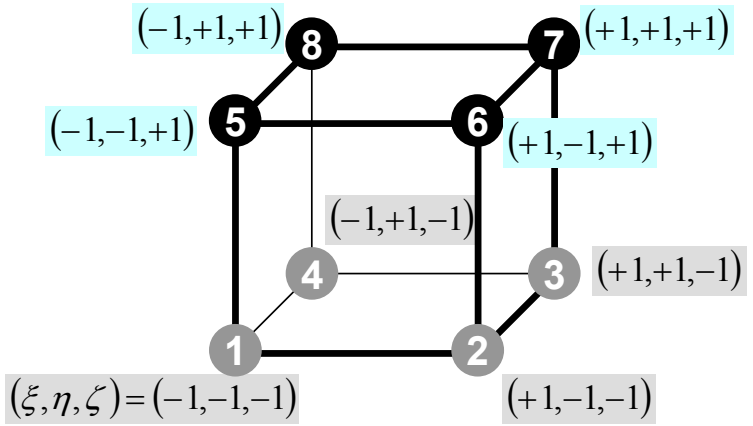
自然座標系における偏微分（4/4）

- 従って下記のように偏微分を計算できる
  - ヤコビアン（3×3行列）の逆行列を求める

$$\begin{Bmatrix} \frac{\partial N_i}{\partial x} \\ \frac{\partial N_i}{\partial y} \\ \frac{\partial N_i}{\partial z} \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial x}{\partial \xi} & \frac{\partial y}{\partial \xi} & \frac{\partial z}{\partial \xi} \\ \frac{\partial x}{\partial \eta} & \frac{\partial y}{\partial \eta} & \frac{\partial z}{\partial \eta} \\ \frac{\partial x}{\partial \zeta} & \frac{\partial y}{\partial \zeta} & \frac{\partial z}{\partial \zeta} \end{bmatrix}^{-1} \begin{Bmatrix} \frac{\partial N_i}{\partial \xi} \\ \frac{\partial N_i}{\partial \eta} \\ \frac{\partial N_i}{\partial \zeta} \end{Bmatrix} = \left[J \right]^{-1} \begin{Bmatrix} \frac{\partial N_i}{\partial \xi} \\ \frac{\partial N_i}{\partial \eta} \\ \frac{\partial N_i}{\partial \zeta} \end{Bmatrix}$$

要素単位での積分

$$\left[k_{ij}\right] \quad (i, j = 1 \ldots 8)$$

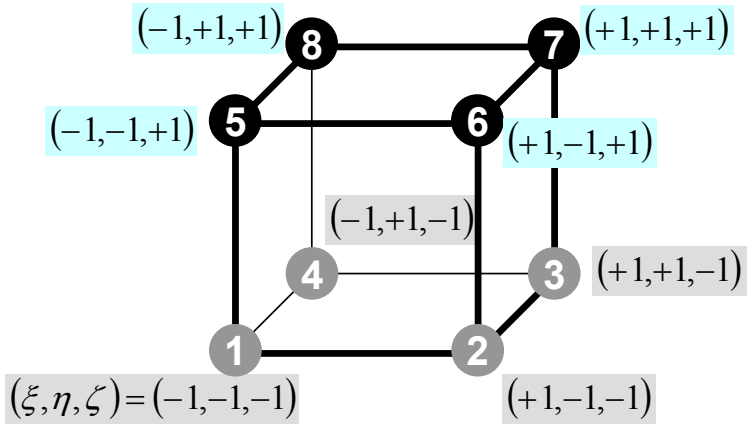


$$k_{ij} = -\int_V \left\{ \lambda \cdot N_{i,x} \cdot N_{j,x} + \lambda \cdot N_{i,y} \cdot N_{j,y} + \lambda \cdot N_{i,z} \cdot N_{j,z} \right\} dV$$

$$= -\int_V \left\{ \lambda \frac{\partial N_i}{\partial x} \frac{\partial N_j}{\partial x} + \lambda \frac{\partial N_i}{\partial y} \frac{\partial N_j}{\partial y} + \lambda \frac{\partial N_i}{\partial z} \frac{\partial N_j}{\partial z} \right\} dV$$

自然座標系での積分

$$\left[k_{ij}\right] \quad (i, j = 1 \ldots 8)$$



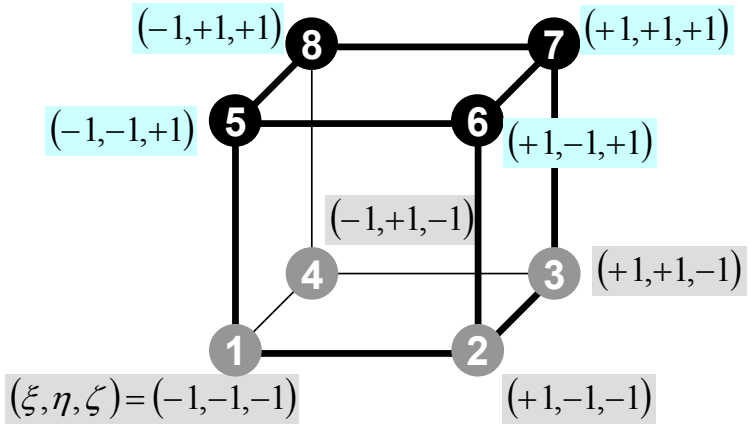
$$-\int_V \left\{ \lambda \frac{\partial N_i}{\partial x}\frac{\partial N_j}{\partial x} + \lambda \frac{\partial N_i}{\partial y}\frac{\partial N_j}{\partial y} + \lambda \frac{\partial N_i}{\partial z}\frac{\partial N_j}{\partial z} \right\} dV =$$

$$-\int\int\int \left\{ \lambda \frac{\partial N_i}{\partial x}\frac{\partial N_j}{\partial x} + \lambda \frac{\partial N_i}{\partial y}\frac{\partial N_j}{\partial y} + \lambda \frac{\partial N_i}{\partial z}\frac{\partial N_j}{\partial z} \right\} dxdydz =$$

$$-\int_{-1}^{+1}\int_{-1}^{+1}\int_{-1}^{+1} \left\{ \lambda \frac{\partial N_i}{\partial x}\frac{\partial N_j}{\partial x} + \lambda \frac{\partial N_i}{\partial y}\frac{\partial N_j}{\partial y} + \lambda \frac{\partial N_i}{\partial z}\frac{\partial N_j}{\partial z} \right\} \det\left|J\right| d\xi d\eta d\zeta$$

ガウスの積分公式

$$\left[k_{ij}\right] \quad (i, j = 1 \ldots 8)$$



$$-\int_{-1}^{+1}\int_{-1}^{+1}\int_{-1}^{+1}\left\{\lambda\frac{\partial N_i}{\partial x}\frac{\partial N_j}{\partial x}+\lambda\frac{\partial N_i}{\partial y}\frac{\partial N_j}{\partial y}+\lambda\frac{\partial N_i}{\partial z}\frac{\partial N_j}{\partial z}\right\}\det|J|\,d\xi d\eta d\zeta$$

$$I=\int_{-1}^{+1}\int_{-1}^{+1}\int_{-1}^{+1} f(\xi,\eta,\zeta)\,d\xi d\eta d\zeta$$

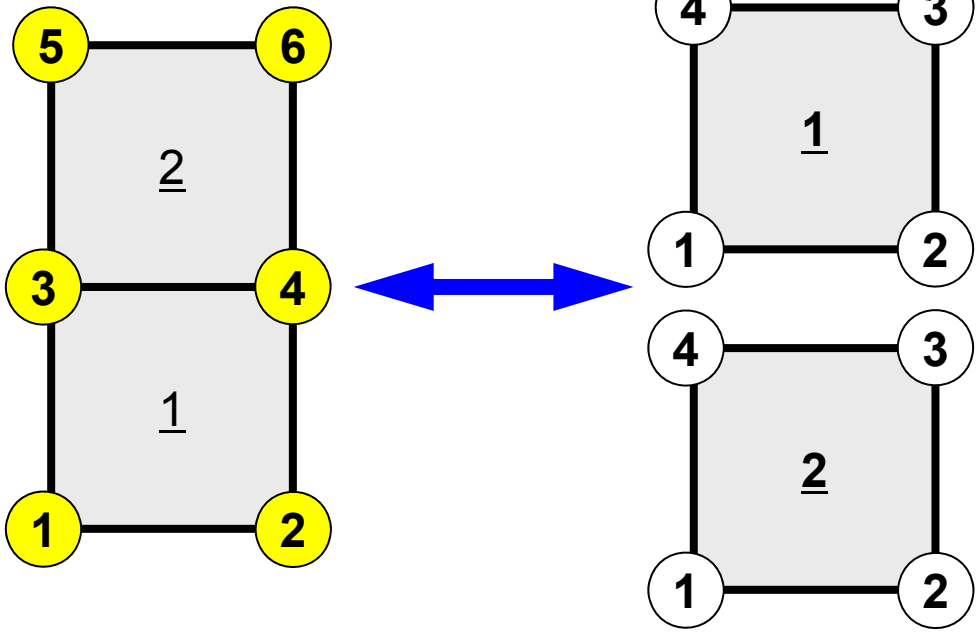
$$=\sum_{i=1}^{L}\sum_{j=1}^{M}\sum_{k=1}^{N}\left[W_i\cdot W_j\cdot W_k\cdot f(\xi_i,\eta_j,\zeta_k)\right]$$

残りの手順

- ここまでで，要素ごとの積分が可能となる。
- あとは：
  - 全体マトリクスへの重ね合わせ
  - 境界条件処理
  - 連立一次方程式を解く・・・

- 詳細はプログラムの内容を解説しながら説明する。

要素⇒全体マトリクス重ね合わせ



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

$$\begin{bmatrix} k_{11}^{(2)} & k_{12}^{(2)} & k_{13}^{(2)} & k_{14}^{(2)} \\ k_{21}^{(2)} & k_{22}^{(2)} & k_{23}^{(2)} & k_{24}^{(2)} \\ k_{31}^{(2)} & k_{32}^{(2)} & k_{33}^{(2)} & k_{34}^{(2)} \\ k_{41}^{(2)} & k_{42}^{(2)} & k_{43}^{(2)} & k_{44}^{(2)} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \phi_1^{(2)} \\ \phi_2^{(2)} \\ \phi_3^{(2)} \\ \phi_4^{(2)} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} f_1^{(2)} \\ f_2^{(2)} \\ f_3^{(2)} \\ f_4^{(2)} \end{Bmatrix}$$

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

$$\begin{bmatrix} k_{11}^{(1)} & k_{12}^{(1)} & k_{13}^{(1)} & k_{14}^{(1)} \\ k_{21}^{(1)} & k_{22}^{(1)} & k_{23}^{(1)} & k_{24}^{(1)} \\ k_{31}^{(1)} & k_{32}^{(1)} & k_{33}^{(1)} & k_{34}^{(1)} \\ k_{41}^{(1)} & k_{42}^{(1)} & k_{43}^{(1)} & k_{44}^{(1)} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \phi_1^{(1)} \\ \phi_2^{(1)} \\ \phi_3^{(1)} \\ \phi_4^{(1)} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} f_1^{(1)} \\ f_2^{(1)} \\ f_3^{(1)} \\ f_4^{(1)} \end{Bmatrix}$$

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

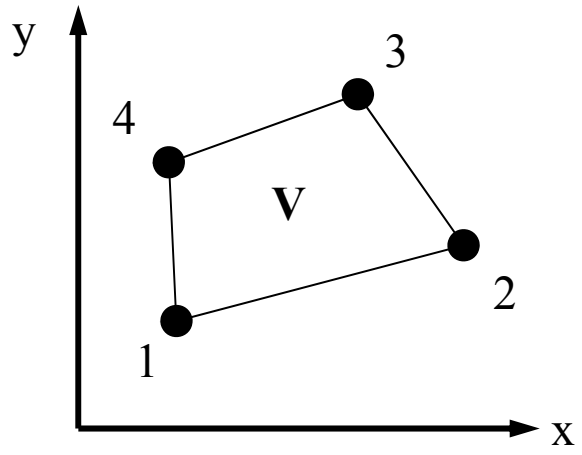
$$\begin{bmatrix} D_1 & X & X & X & & \\ X & D_2 & X & X & & \\ X & X & D_3 & X & X & X \\ X & X & X & D_4 & X & X \\ & & X & X & D_5 & X \\ & & X & X & X & D_6 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \Phi_1 \\ \Phi_2 \\ \Phi_3 \\ \Phi_4 \\ \Phi_5 \\ \Phi_6 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} B_1 \\ B_2 \\ B_3 \\ B_4 \\ B_5 \\ B_6 \end{Bmatrix}$$

- 三次元要素の定式化
- 三次元弾性力学方程式
  - ガラーキン法
  - 要素マトリクス生成
  - 演習

- プログラムの実行
- データ構造
- プログラムの構成

演 習

- ガウスの積分公式を使用して以下の四角形の面積を求めよ（プログラムを作って，計算機で計算してください）



1:(1.0, 1.0)
2:(4.0, 2.0)
3:(3.0, 5.0)
4:(2.0, 4.0)

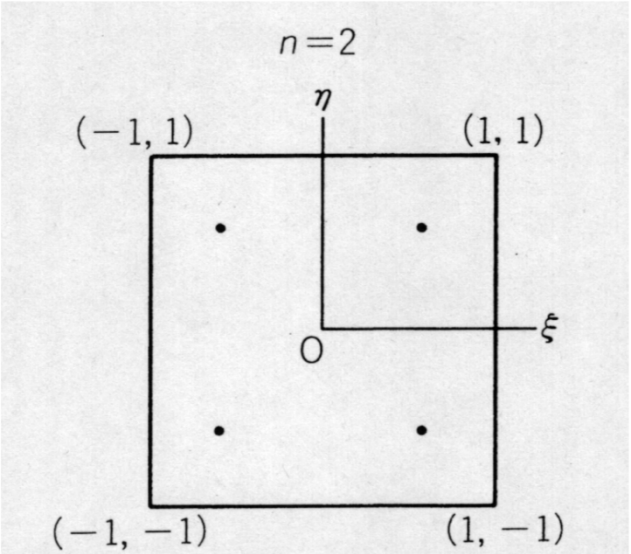
$$I = \int_V dV = \int_{-1}^{+1}\int_{-1}^{+1} \det|J|\, d\xi d\zeta$$

ヒント（1/2）

- 座標値によってヤコビアン（ヤコビの行列）を計算
- ガウスの積分公式（n=2）に代入する。

$$I=\int_{-1}^{+1}\int_{-1}^{+1} f(\xi,\eta)\,d\xi d\eta=\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n}\left[W_i\cdot W_j\cdot f(\xi_i,\eta_j)\right]$$

```
implicit REAL*8 (A-H,O-Z)
real*8 W(2)
real*8 POI(2)

W(1)= 1.0d0
W(2)= 1.0d0
POI(1)= -0.5773502692d0
POI(2)= +0.5773502692d0

SUM= 0.d0
do jp= 1, 2
do ip= 1, 2
  FC = F(POI(ip),POI(jp))
  SUM= SUM + W (ip)*W (jp)*FC
enddo
enddo
```



ヒント（2/2）

$$[J]=\begin{bmatrix}\dfrac{\partial x}{\partial \xi} & \dfrac{\partial y}{\partial \xi}\\ \dfrac{\partial x}{\partial \eta} & \dfrac{\partial y}{\partial \eta}\end{bmatrix},\quad \det|J|=\frac{\partial x}{\partial \xi}\cdot\frac{\partial y}{\partial \eta}-\frac{\partial y}{\partial \xi}\cdot\frac{\partial x}{\partial \eta}$$

$$\frac{\partial x}{\partial \xi}=\frac{\partial}{\partial \xi}\left(\sum_{i=1}^{4}N_i x_i\right)=\sum_{i=1}^{4}\frac{\partial N_i}{\partial \xi}x_i,\quad \frac{\partial y}{\partial \xi}=\frac{\partial}{\partial \xi}\left(\sum_{i=1}^{4}N_i y_i\right)=\sum_{i=1}^{4}\frac{\partial N_i}{\partial \xi}y_i,$$

$$\frac{\partial x}{\partial \eta}=\frac{\partial}{\partial \eta}\left(\sum_{i=1}^{4}N_i x_i\right)=\sum_{i=1}^{4}\frac{\partial N_i}{\partial \eta}x_i,\quad \frac{\partial y}{\partial \eta}=\frac{\partial}{\partial \eta}\left(\sum_{i=1}^{4}N_i y_i\right)=\sum_{i=1}^{4}\frac{\partial N_i}{\partial \eta}y_i$$

$$N_1(\xi,\eta)=\frac{1}{4}(1-\xi)(1-\eta),\quad N_2(\xi,\eta)=\frac{1}{4}(1+\xi)(1-\eta),$$

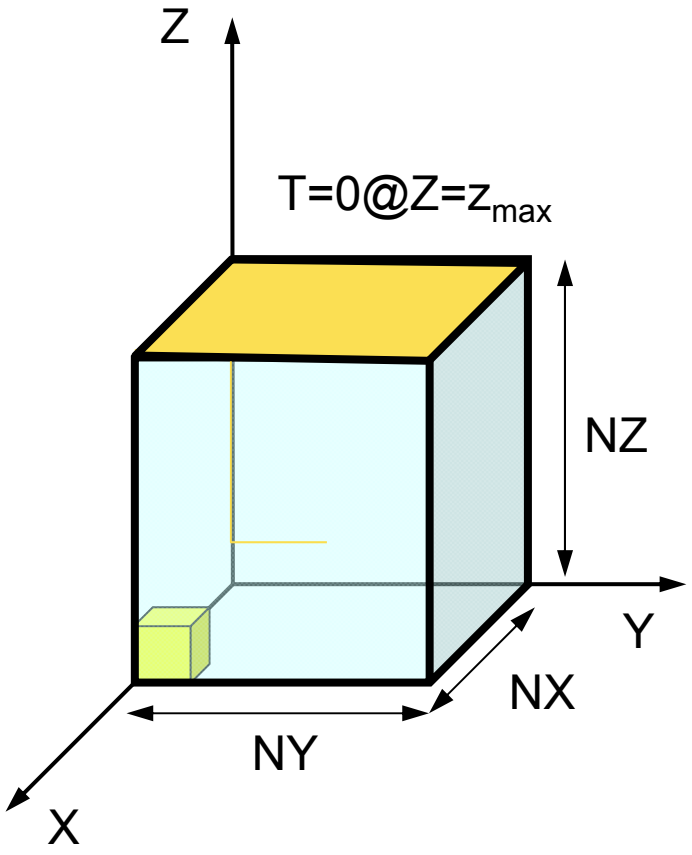
$$N_3(\xi,\eta)=\frac{1}{4}(1+\xi)(1+\eta),\quad N_4(\xi,\eta)=\frac{1}{4}(1-\xi)(1+\eta)$$

- 三次元要素の定式化
- 三次元弾性力学方程式
  - ガラーキン法
  - 要素マトリクス生成

- プログラムの実行
- データ構造
- プログラムの構成

対象とする問題：三次元定常熱伝導

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



- 定常熱伝導＋発熱
- 一様な熱伝導率 λ
- 直方体
  - 一辺長さ1の立方体（六面体）要素
  - 各方向にNX・NY・NZ個
- 境界条件
  - T=0@Z=z_{max}
- 体積当たり発熱量は位置（メッシュの中心の座標 x_c,y_c）に依存
  - $\dot{Q}(x,y,z)=QVOL|x_C+y_C|$

インストール（Cygwinでは*.exe）

インストール

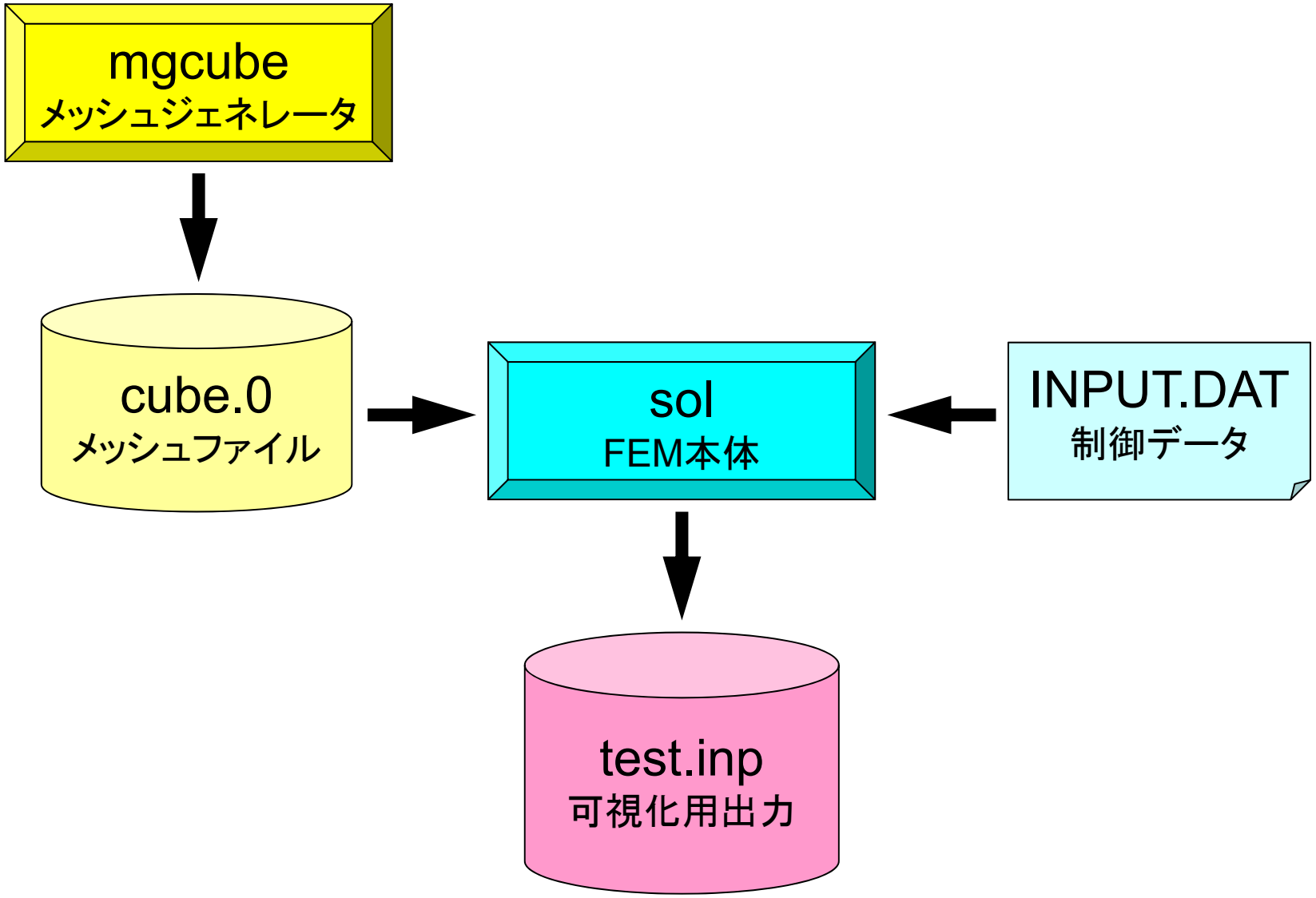
```
>$ cd <$P-TOP>/fem3d/src
>$ make
>$ ls ../run/sol
   sol
```

メッシュジェネレータインストール

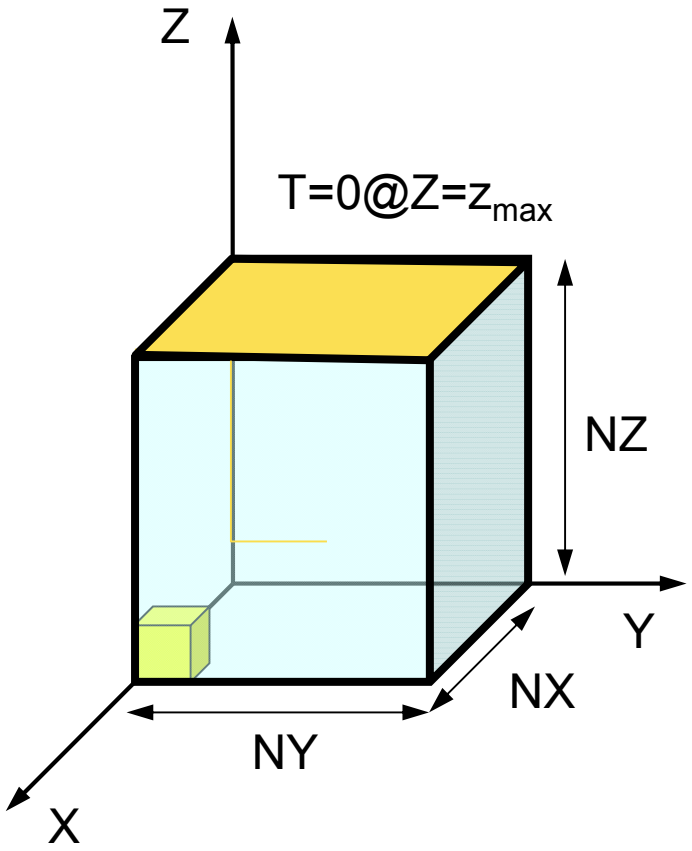
```
>$ cd <$P-TOP>/fem3d/run
>$ gfortran -O3 mgcube.f -o mgcube
```

計算の流れ

メッシュ生成⇒計算，ファイル名称固定



メッシュ生成（Cygwinでは mgcube.exe）




```
>$ cd <$P-TOP>/fem3d/run
>$ ./mgcube

   NX, NY, NZ          ← 各辺長さを
                          訊いてくる
   20 20 20            ← このように
                          入れてみる

>$ ls cube.0              生成を確認

    cube.0
```

制御ファイル：INPUT.DAT

```
INPUT.DAT

cube.0          fname
2000            ITER
1.0 1.0         COND, QVOL
1.0e-08         RESID
```

- fname：　メッシュファイル名
- ITER：　反復回数上限
- COND：　熱伝導率
- QVOL：　体積当たり発熱量係数
- RESID：　反復法の収束判定値

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

$$\dot{Q}(x,y,z)=QVOL\left|x_C+y_C\right|$$

実 行（Cygwinではsol.exe

```
>$ cd <$P-TOP>/fem3d/run
>$ ./sol

>$ ls test.inp          生成を確認
    test.inp
```

ParaView

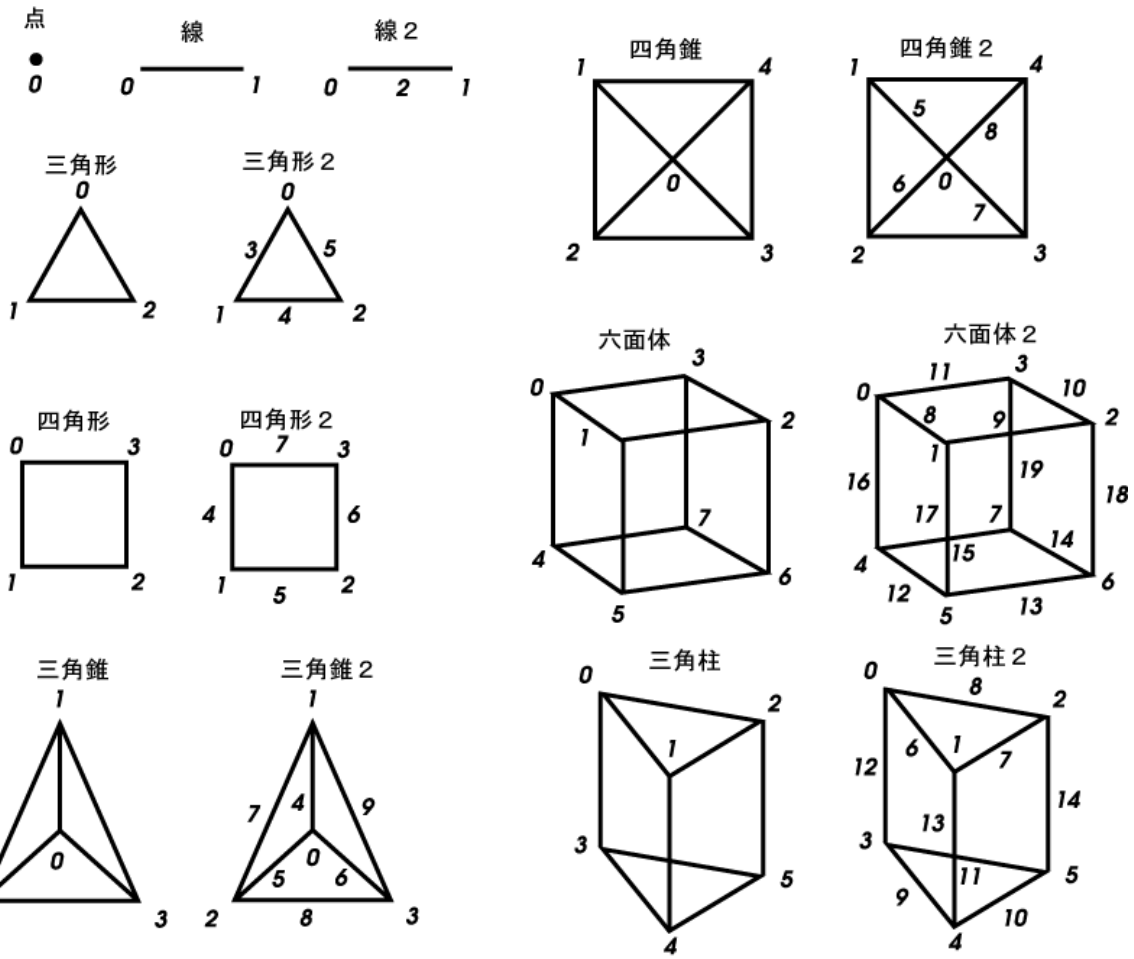
- http://www.paraview.org/

- ファイルを開く
- 図の表示
- イメージファイルの保存

- http://nkl.cc.u-tokyo.ac.jp/class/HowtouseParaView.pdf

UCD Format (1/3)
Unstructured Cell Data

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



UCD Format (2/3)

- Originally for AVS, microAVS
- Extension of the UCD file is “inp”
- There are two types of formats. Only old type can be read by ParaView.

UCD Format (3/3): Old Format

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

.
.
.

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

.
.
.

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

.
.
.

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

.
.
.

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

.
.
.

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

.
.
.

- 三次元要素の定式化
- 三次元弾性力学方程式
  - ガラーキン法
  - 要素マトリクス生成

- プログラムの実行
- データ構造
- プログラムの構成

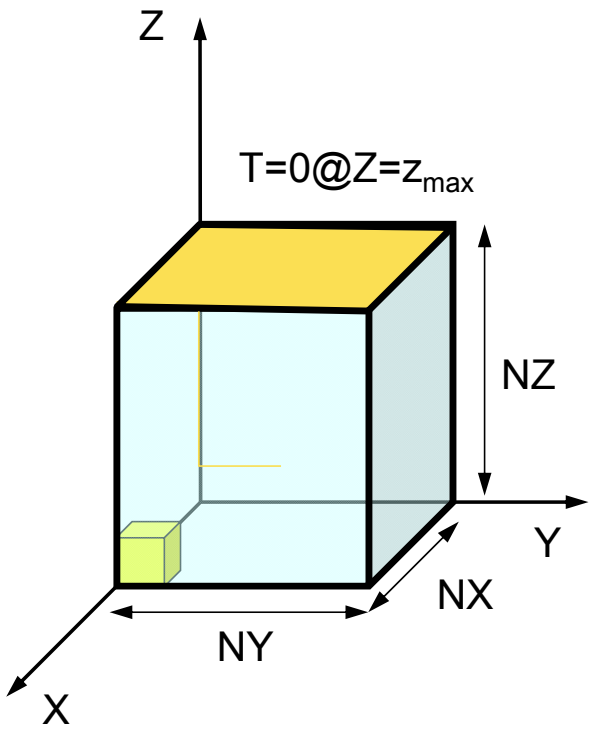
メッシュファイル構成：cube.0

番号は「1」から始まっている

- 節点データ
  - 節点数
  - 節点番号，座標
- 要素データ
  - 要素数
  - 要素タイプ
  - 要素番号，材料番号，コネクティビティ
- 節点グループデータ
  - グループ数
  - グループ内節点数
  - グループ名
  - グループ内節点

cube.0：節点データ （NX=NY=NZ=4）

```
  125                                          =5*5*5（節点数）
    1      0.00      0.00      0.00
    2      1.00      0.00      0.00
    3      2.00      0.00      0.00
    4      3.00      0.00      0.00
    5      4.00      0.00      0.00
    6      0.00      1.00      0.00
    7      1.00      1.00      0.00
    8      2.00      1.00      0.00
    9      3.00      1.00      0.00

...

  121      0.00      4.00      4.00
  122      1.00      4.00      4.00
  123      2.00      4.00      4.00
  124      3.00      4.00      4.00
  125      4.00      4.00      4.00

節点ID    X座標    Y座標    Z座標
```

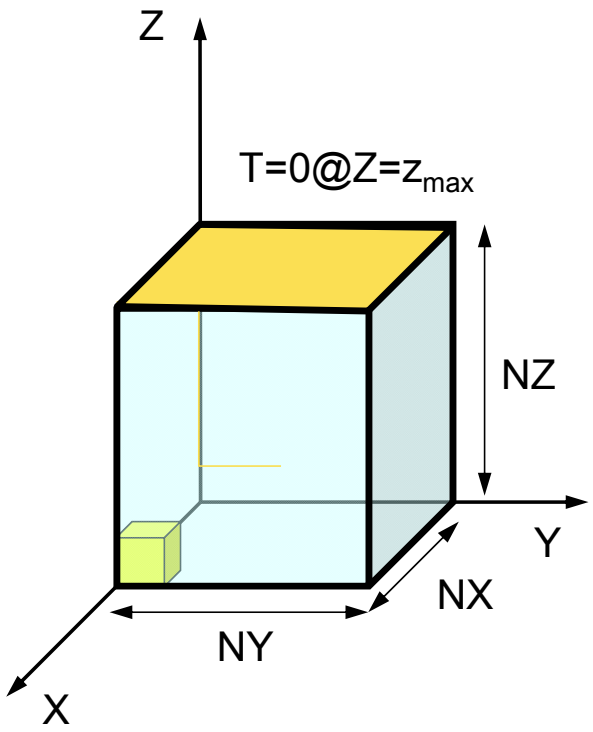


movie

cube.0：要素データ（1/2）

```
  64                                                    =4*4*4（要素数）
 361  361  361  361  361  361  361  361  361  361
 361  361  361  361  361  361  361  361  361  361
 361  361  361  361  361  361  361  361  361  361
 361  361  361  361  361  361  361  361  361  361
 361  361  361  361  361  361  361  361  361  361
 361  361  361  361  361  361  361  361  361  361
 361  361  361  361
```

要素タイプ：361
三次元，六面体，一次

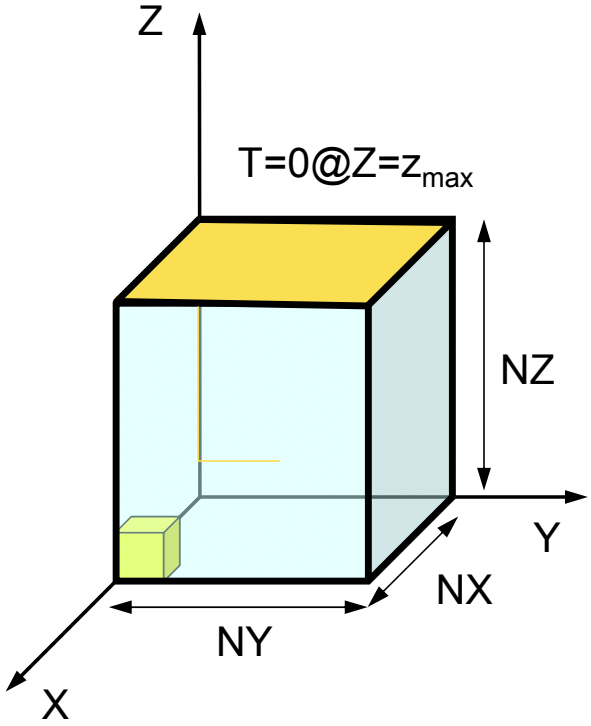


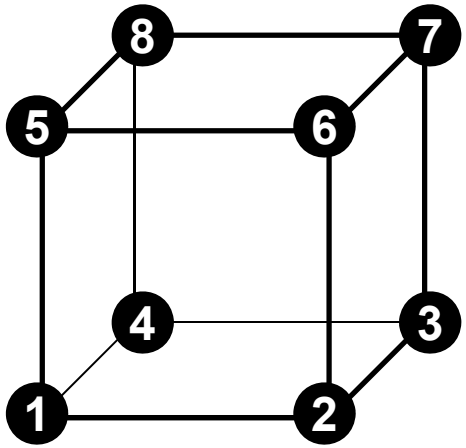
movie

cube.0：要素データ（2/2）

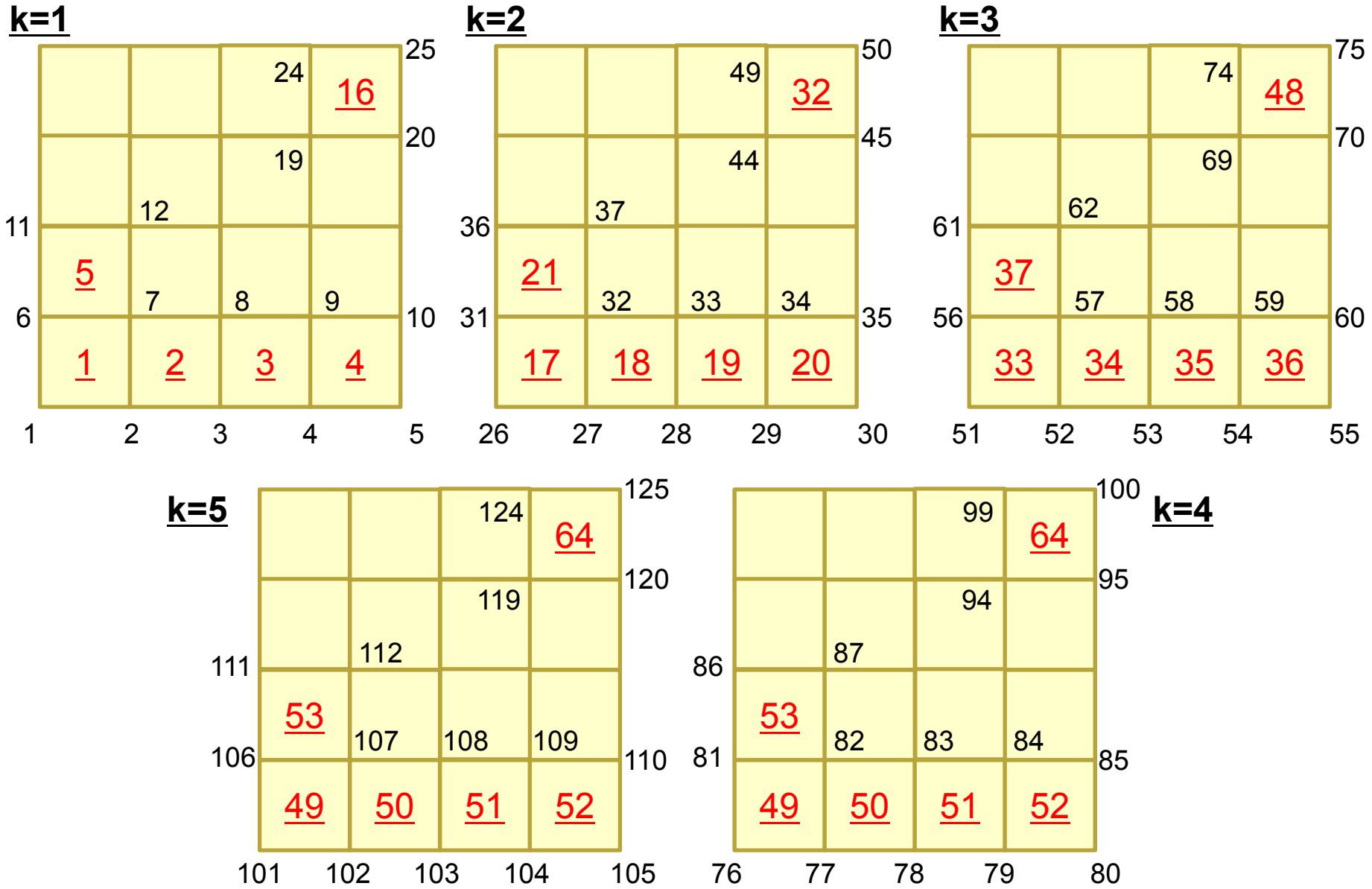
1	1	1	2	7	6	26	27	32	31
2	1	2	3	8	7	27	28	33	32
3	1	3	4	9	8	28	29	34	33
4	1	4	5	10	9	29	30	35	34
5	1	6	7	12	11	31	32	37	36
6	1	7	8	13	12	32	33	38	37
7	1	8	9	14	13	33	34	39	38
8	1	9	10	15	14	34	35	40	39
9	1	11	12	17	16	36	37	42	41
10	1	12	13	18	17	37	38	43	42
11	1	13	14	19	18	38	39	44	43
12	1	14	15	20	19	39	40	45	44
13	1	16	17	22	21	41	42	47	46
...									
53	1	81	82	87	86	106	107	112	111
54	1	82	83	88	87	107	108	113	112
55	1	83	84	89	88	108	109	114	113
56	1	84	85	90	89	109	110	115	114
57	1	86	87	92	91	111	112	117	116
58	1	87	88	93	92	112	113	118	117
59	1	88	89	94	93	113	114	119	118
60	1	89	90	95	94	114	115	120	119
61	1	91	92	97	96	116	117	122	121
62	1	92	93	98	97	117	118	123	122
63	1	93	94	99	98	118	119	124	123
64	1	94	95	100	99	119	120	125	124

要素ID 材料ID 8節点ID



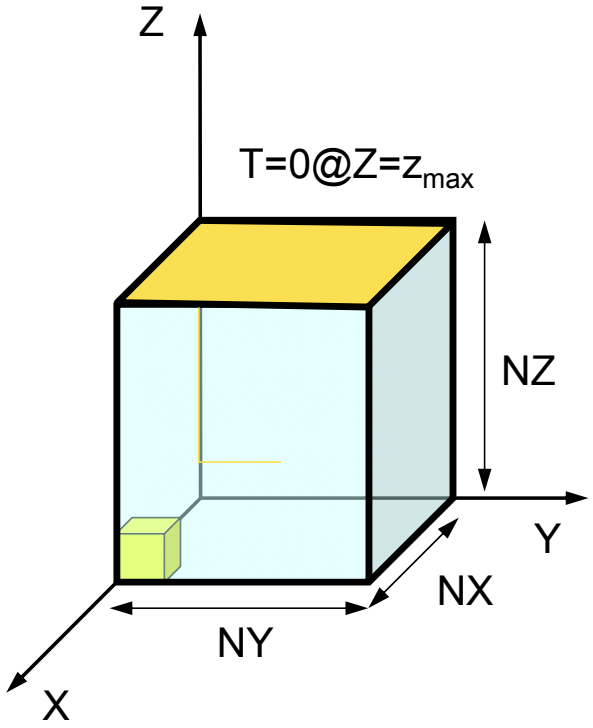


NX=NY=NZ=4, NXP1=NYP1=NZP1=5
ICELTOT= 64, INODTOT= 125, IBNODTOT= 25

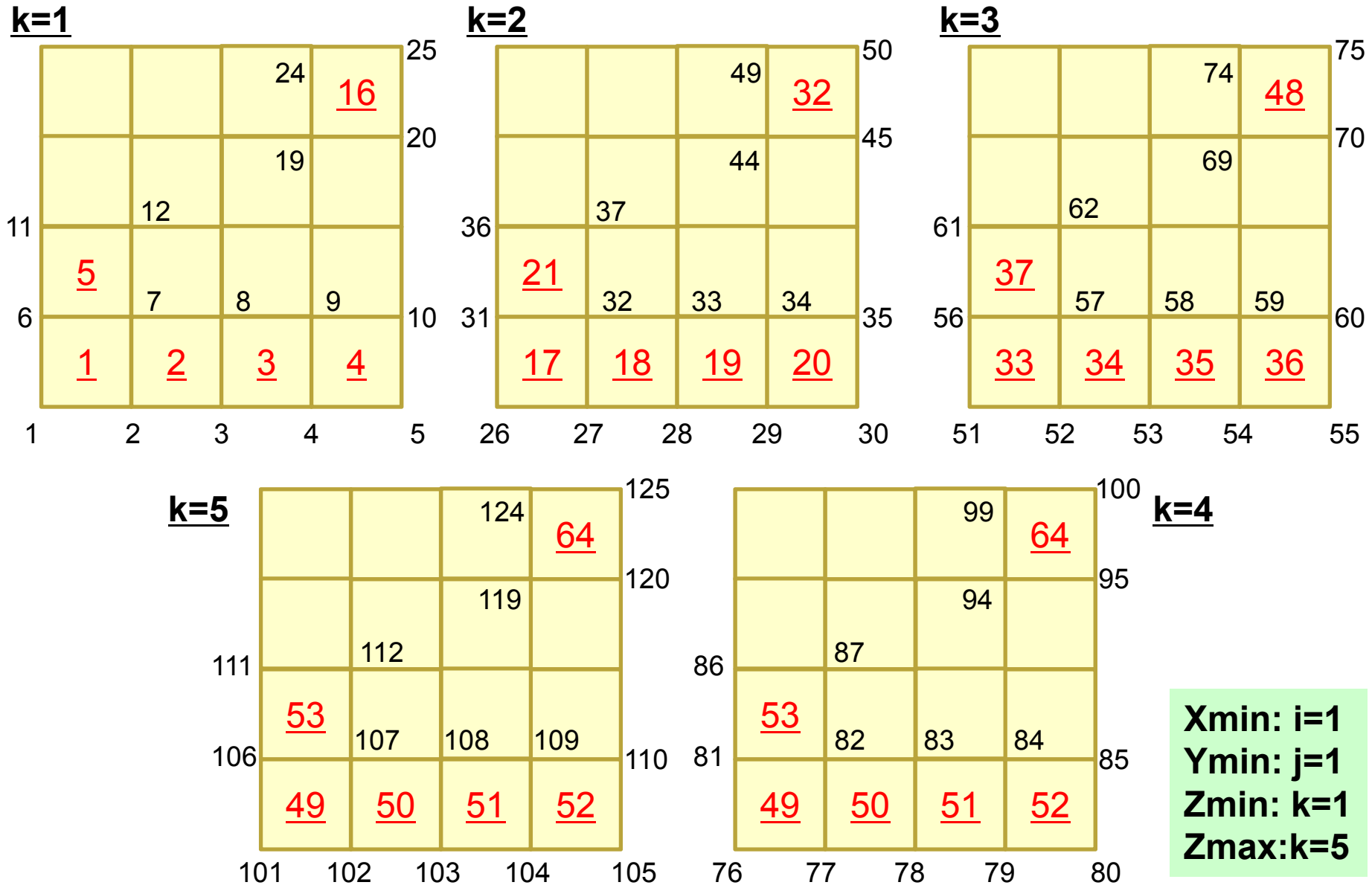


cube.0：節点グループデータ

```
  4                                    グループ総数
 25  50  75 100                       各グループ節点数（累積）

Xmin
   1   6  11  16  21  26  31  36  41  46
  51  56  61  66  71  76  81  86  91  96
 101 106 111 116 121

Ymin
   1   2   3   4   5  26  27  28  29  30
  51  52  53  54  55  76  77  78  79  80
 101 102 103 104 105

Zmin
   1   2   3   4   5   6   7   8   9  10
  11  12  13  14  15  16  17  18  19  20
  21  22  23  24  25

Zmax
 101 102 103 104 105 106 107 108 109 110
 111 112 113 114 115 116 117 118 119 120
 121 122 123 124 125

（以下　使用せず）
```



NX=NY=NZ=4, NXP1=NYP1=NZP1=5
ICELTOT= 64, INODTOT= 125, IBNODTOT= 25



メッシュ生成

- 実は技術的には大きな課題
  - 複雑形状
  - 大規模メッシュ
- 並列化が難しい

- 市販のメッシュ生成アプリケーション
  - FEMAP
    - CADデータとのインタフェース

movie

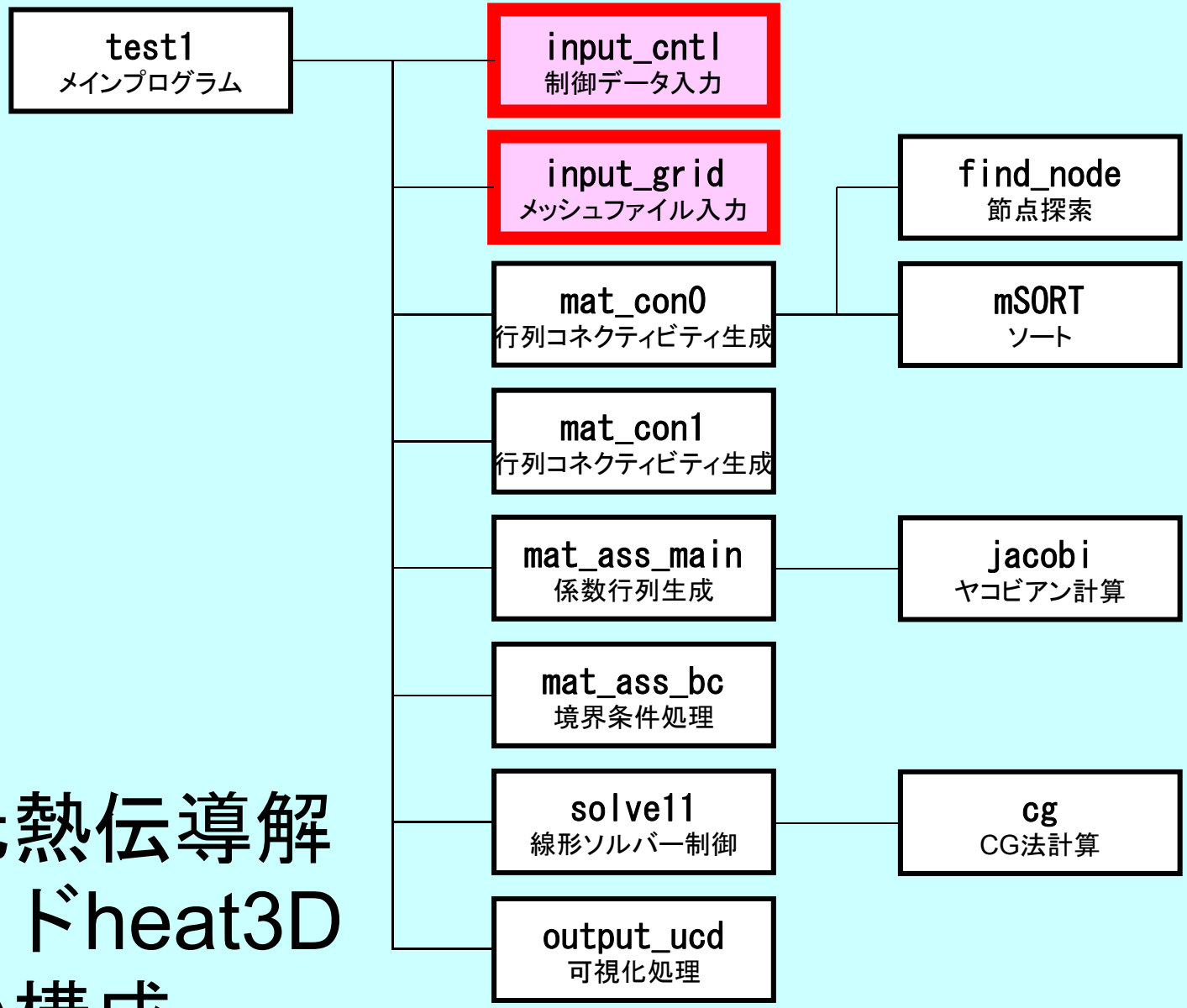
- 三次元要素の定式化
- 三次元弾性力学方程式
  - ガラーキン法
  - 要素マトリクス生成

- プログラムの実行
- データ構造
- プログラムの構成

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）

三次元熱伝導解析コードheat3Dの構成



全体処理

```
      program heat3D

      use solver11
      use pfem_util

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

      call INPUT_CNTL
      call INPUT_GRID

      call MAT_CON0
      call MAT_CON1

      call MAT_ASS_MAIN
      call MAT_ASS_BC

      call SOLVE11

      call OUTPUT_UCD

      end program heat3D
```

Global変数表：pfem_util.f（1/3）

変数名	種別	サイズ	I/O	内　容
fname	C	(80)	I	メッシュファイル名
N,NP	I		I	節点数
ICELTOT	I		I	要素数
NODGRPtot	I		I	節点グループ数
XYZ	R	(N,3)	I	節点座標
ICELNOD	I	(ICELTOT,8)	I	要素コネクティビティ
NODGRP_INDEX	I	(0:NODGRPtot)	I	各節点グループに含まれる節点数（累積）
NODGRP_ITEM	I	(NODGRP_INDEX(NODGRPTOT)	I	節点グループに含まれる節点
NODGRP_NAME	C80	(NODGRPTOT)	I	節点グループ名
NLU	I		O	各節点非対角成分数
NPLU	I		O	非対角成分総数
D	R	(N)	O	全体行列：対角ブロック
B,X	R	(N)	O	右辺ベクトル，未知数ベクトル

Global変数表：pfem_util.f（2/3）

変数名	種別	サイズ	I/O	内　容
AMAT	R	(NPLU)	O	全体行列：非零非対角成分
index	I	(0:N)	O	全体行列：非零非対角成分数
item	I	(NPLU)	O	全体行列：非零非対角成分（列番号）
INLU	I	(N)	O	各節点の非零非対角成分数
IALU	I	(N,NLU)	O	各節点の非零非対角成分数（列番号）
IWKX	I	(N,2)	O	ワーク用配列
ITER, ITERactual	I		I	反復回数の上限，実際の反復回数
RESID	R		I	打ち切り誤差（1.e-8に設定）
pfemIarray	I	(100)	O	諸定数（整数）
pfemRarray	R	(100)	O	諸定数（実数）

Global変数表：pfem_util.f（3/3）

変数名	種別	サイズ	I/O	内　容
O8th	R		I	=0.125
PNQ, PNE, PNT	R	(2,2,8)	O	各ガウス積分点における $\frac{\partial N_i}{\partial \xi}, \frac{\partial N_i}{\partial \eta}, \frac{\partial N_i}{\partial \zeta} (i=1\sim 8)$
POS, WEI	R	(2,2)	O	各ガウス積分点の座標，重み係数
NCOL1, NCOL2	I	(100)	O	ソート用ワーク配列
SHAPE	R	(2,2,2,8)	O	各ガウス積分点における形状関数 N_i (i=1~8)
PNX, PNY, PNZ	R	(2,2,2,8)	O	各ガウス積分点における $\frac{\partial N_i}{\partial x}, \frac{\partial N_i}{\partial y}, \frac{\partial N_i}{\partial z} (i=1\sim 8)$
DETJ	R	(2,2,2)	O	各ガウス積分点におけるヤコビアン行列式
COND, QVOL	R		I	熱伝導率，体積当たり発熱量係数

制御ファイル入力：INPUT_CNTL

```
subroutine INPUT_CNTL
use pfem_util

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

  open (11,file= 'INPUT.DAT', status='unknown')
  read (11,'(a80)') fname
  read (11,*) ITER
  read (11,*) COND, QVOL
  read (11,*) RESID
  close (11)

pfemIarray(1)= ITER
pfemRarray(1)= RESID

return
end
```

INPUT.DAT

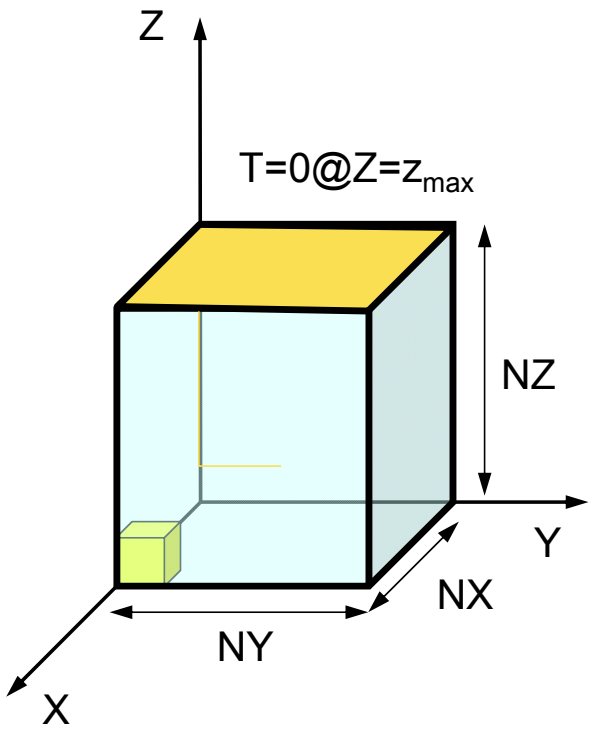
```
cube.0          fname
2000            ITER
1.0 1.0         COND, QVOL
1.0e-08         RESID
```

メッシュ入力：INPUT_GRID（1/3）

```
!C***
!C*** INPUT_GRID
!C***
!C
      subroutine INPUT_GRID
      use pfem_util
      implicit REAL*8 (A-H,O-Z)

      open (11, file= fname, status= 'unknown', form= 'formatted')

!C
!C-- NODE
      read (11,*)  N
      NP= N

      allocate (XYZ(N,3))
      XYZ= 0.d0
        do i= 1, N
          read (11,*) ii, (XYZ(i,kk),kk=1,3)
        enddo
```

cube.0：節点データ （NX=NY=NZ=4）

```
  125                                        = N
    1      0.00      0.00      0.00
    2      1.00      0.00      0.00
    3      2.00      0.00      0.00
    4      3.00      0.00      0.00
    5      4.00      0.00      0.00
    6      0.00      1.00      0.00
    7      1.00      1.00      0.00
    8      2.00      1.00      0.00
    9      3.00      1.00      0.00

...

  121      0.00      4.00      4.00
  122      1.00      4.00      4.00
  123      2.00      4.00      4.00
  124      3.00      4.00      4.00
  125      4.00      4.00      4.00

                  XYZ(i,3)
```



movie

allocate, deallocate関数（C言語）

```
#include <stdio.h>
#include <stdlib.h>
void* allocate_vector(int size,int m)
{
  void *a;
  if ( ( a=(void * )malloc( m * size ) ) == NULL ) {
     fprintf(stdout,"Error:Memory does not enough! in vector ¥n");
     exit(1);
  }
  return a;
}

void deallocate_vector(void *a)
{
  free( a );
}

void** allocate_matrix(int size,int m,int n)
{
  void **aa;
  int i;
  if ( ( aa=(void ** )malloc( m * sizeof(void*) ) ) == NULL ) {
     fprintf(stdout,"Error:Memory does not enough! aa in matrix ¥n");
     exit(1);
  }
  if ( ( aa[0]=(void * )malloc( m * n * size ) ) == NULL ) {
     fprintf(stdout,"Error:Memory does not enough! in matrix ¥n");
     exit(1);
  }
        for(i=1;i<m;i++) aa[i]=(char*)aa[i-1]+size*n;
  return aa;
}

void deallocate_matrix(void **aa)
{
        free( aa );
}
```

allocateをFORTRAN並みに簡単にやるための関数

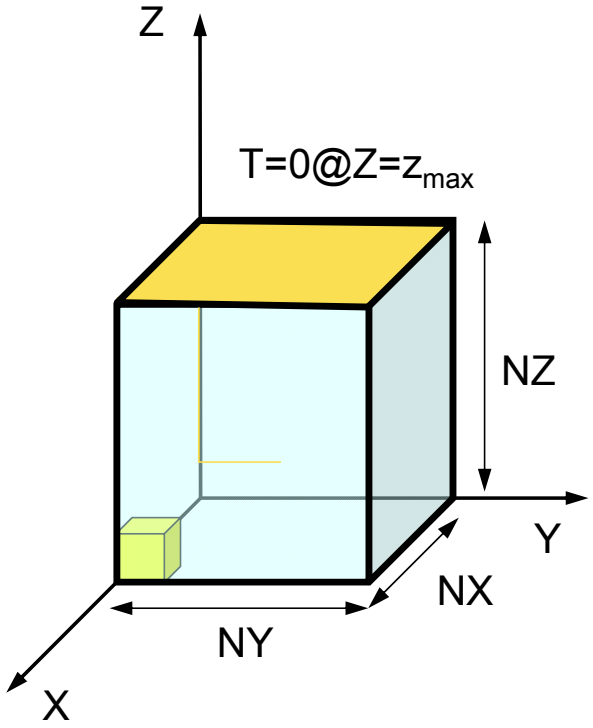
メッシュ入力：INPUT_GRID（2/3）

```
!C
!C-- ELEMENT
      read (11,*)  ICELTOT
      allocate (ICELNOD(ICELTOT,8))
      read (11,'(10i10)') (NTYPE, i= 1, ICELTOT)

      do icel= 1, ICELTOT
        read (11,'(10i10,2i5,8i8)') ii, IMAT, (ICELNOD(icel,k), k=1,8)
      enddo
```

cube.0：要素データ（1/2）

```
 64                                    = ICELTOT

361 361 361 361 361 361 361 361 361 361
361 361 361 361 361 361 361 361 361 361
361 361 361 361 361 361 361 361 361 361
361 361 361 361 361 361 361 361 361 361
361 361 361 361 361 361 361 361 361 361
361 361 361 361 361 361 361 361 361 361
361 361 361 361
```

要素タイプ：361
三次元，六面体，一次

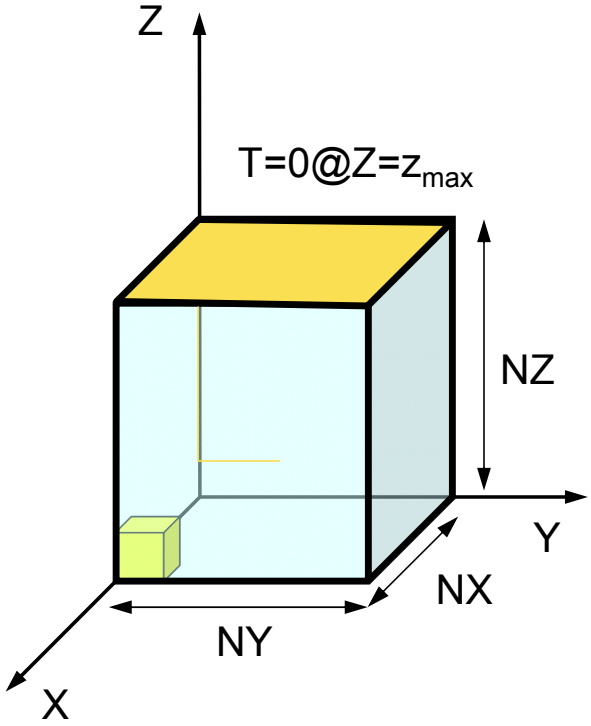


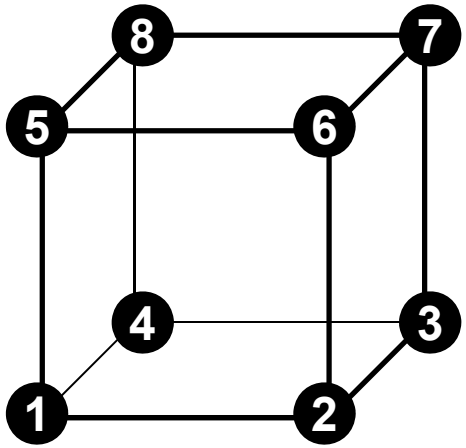
movie

cube.0：要素データ（2/2）

1	1	1	2	7	6	26	27	32	31
2	1	2	3	8	7	27	28	33	32
3	1	3	4	9	8	28	29	34	33
4	1	4	5	10	9	29	30	35	34
5	1	6	7	12	11	31	32	37	36
6	1	7	8	13	12	32	33	38	37
7	1	8	9	14	13	33	34	39	38
8	1	9	10	15	14	34	35	40	39
9	1	11	12	17	16	36	37	42	41
10	1	12	13	18	17	37	38	43	42
11	1	13	14	19	18	38	39	44	43
12	1	14	15	20	19	39	40	45	44
13	1	16	17	22	21	41	42	47	46
...									
53	1	81	82	87	86	106	107	112	111
54	1	82	83	88	87	107	108	113	112
55	1	83	84	89	88	108	109	114	113
56	1	84	85	90	89	109	110	115	114
57	1	86	87	92	91	111	112	117	116
58	1	87	88	93	92	112	113	118	117
59	1	88	89	94	93	113	114	119	118
60	1	89	90	95	94	114	115	120	119
61	1	91	92	97	96	116	117	122	121
62	1	92	93	98	97	117	118	123	122
63	1	93	94	99	98	118	119	124	123
64	1	94	95	100	99	119	120	125	124

iMAT　　ICELNOD(icel,8)





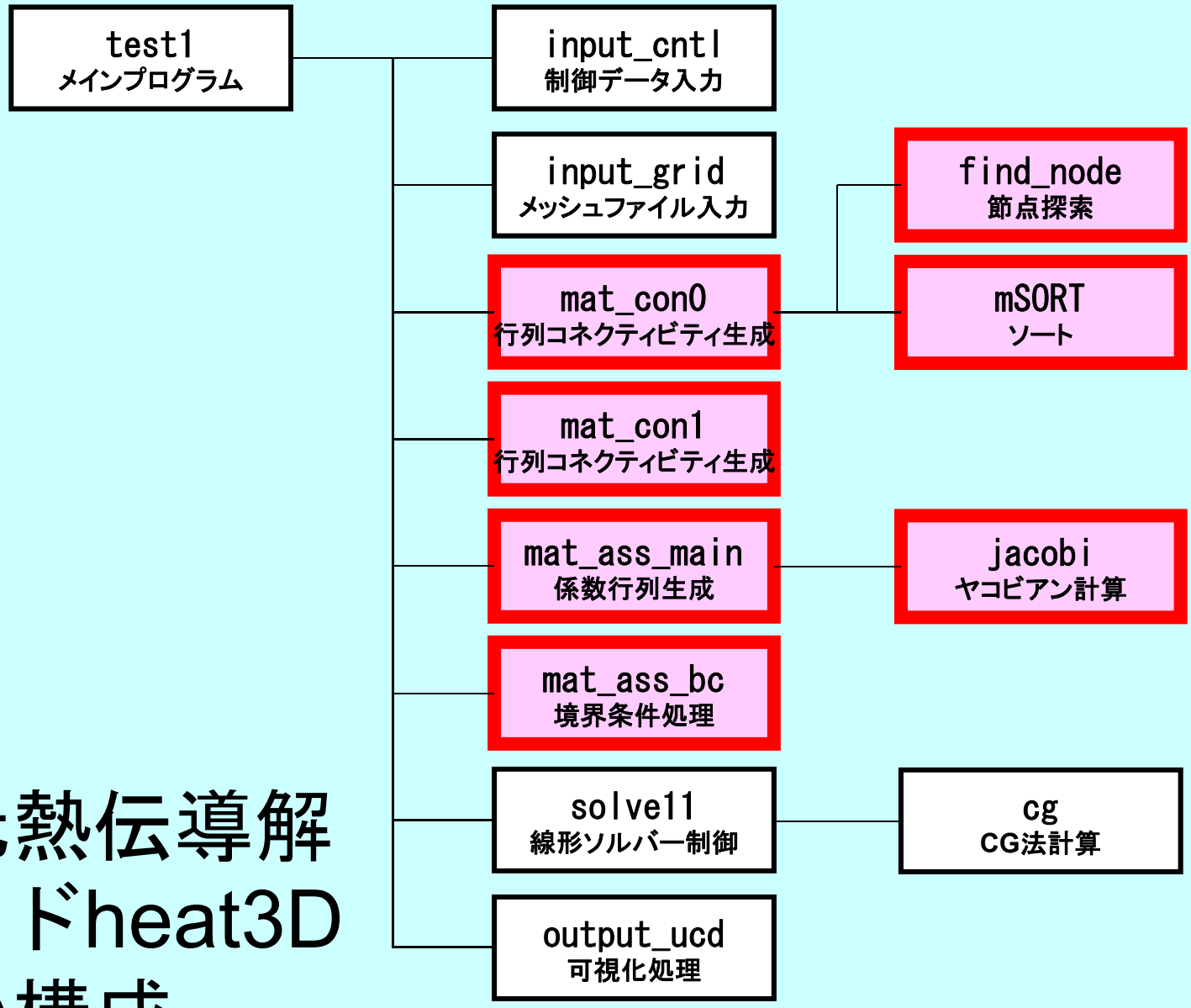
メッシュ入力：INPUT_GRID（3/3）

```
!C
!C-- NODE grp. info.
      read (11,'(10i10)') NODGRPtot
      allocate (NODGRP_INDEX(0:NODGRPtot),NODGRP_NAME(NODGRPtot))
      NODGRP_INDEX= 0

      read (11,'(10i10)') (NODGRP_INDEX(i), i= 1, NODGRPtot)
      nn= NODGRP_INDEX(NODGRPtot)
      allocate (NODGRP_ITEM(nn))

      do k= 1, NODGRPtot
        iS= NODGRP_INDEX(k-1) + 1
        iE= NODGRP_INDEX(k  )
        read (11,'(a80)') NODGRP_NAME(k)
        nn= iE - iS + 1
        if (nn.ne.0) then
          read (11,'(10i10)') (NODGRP_ITEM(kk),kk=iS, iE)
        endif
      enddo

      close (11)

      return
      end
```

cube.0：節点グループデータ

```
  4                                                          NODGRPtot
 25  50  75 100                                             NODGTP_INDEX(1-4)

Xmin                                                         NODGRP_NAME(1)
  1   6  11  16  21  26  31  36  41  46                     NODGRP_ITEM(1-25)
 51  56  61  66  71  76  81  86  91  96
101 106 111 116 121

Ymin                                                         NODGRP_NAME(2)
  1   2   3   4   5  26  27  28  29  30                     NODGRP_ITEM(26-50)
 51  52  53  54  55  76  77  78  79  80
101 102 103 104 105

Zmin                                                         NODGRP_NAME(3)
  1   2   3   4   5   6   7   8   9  10                     NODGRP_ITEM(51-75)
 11  12  13  14  15  16  17  18  19  20
 21  22  23  24  25

Zmax                                                         NODGRP_NAME(4)
101 102 103 104 105 106 107 108 109 110                     NODGRP_ITEM(76-100)
111 112 113 114 115 116 117 118 119 120
121 122 123 124 125
```

三次元熱伝導解析コードheat3Dの構成



Global変数表：pfem_util.h/f（1/3）

変数名	種別	サイズ	I/O	内　容
fname	C	(80)	I	メッシュファイル名
N,NP	I		I	節点数
ICELTOT	I		I	要素数
NODGRPtot	I		I	節点グループ数
XYZ	R	(N,3)	I	節点座標
ICELNOD	I	(ICELTOT,8)	I	要素コネクティビティ
NODGRP_INDEX	I	(0:NODGRPtot)	I	各節点グループに含まれる節点数（累積）
NODGRP_ITEM	I	(NODGRP_INDEX(NODGRPTOT)	I	節点グループに含まれる節点
NODGRP_NAME	C80	(NODGRPTOT)	I	節点グループ名
NLU	I		O	各節点非対角成分数
NPLU	I		O	非対角成分総数
D	R	(N)	O	全体行列：対角ブロック
B,X	R	(N)	O	右辺ベクトル，未知数ベクトル

Global変数表：pfem_util.h/f（2/3）

変数名	種別	サイズ	I/O	内　容
AMAT	R	(NPLU)	O	全体行列：非零非対角成分
index	I	(0:N)	O	全体行列：非零非対角成分数
item	I	(NPLU)	O	全体行列：非零非対角成分（列番号）
INLU	I	(N)	O	各節点の非零非対角成分数
IALU	I	(N,NLU)	O	各節点の非零非対角成分数（列番号）
IWKX	I	(N,2)	O	ワーク用配列
ITER, ITERactual	I		I	反復回数の上限，実際の反復回数
RESID	R		I	打ち切り誤差（1.e-8に設定）
pfemIarray	I	(100)	O	諸定数（整数）
pfemRarray	R	(100)	O	諸定数（実数）

Global変数表：pfem_util.h/f（3/3）

変数名	種別	サイズ	I/O	内　容
08th	R		I	=0.125
PNQ, PNE, PNT	R	(2,2,8)	O	各ガウス積分点における $\frac{\partial N_i}{\partial \xi}, \frac{\partial N_i}{\partial \eta}, \frac{\partial N_i}{\partial \zeta} (i=1\sim 8)$
POS, WEI	R	(2,2)	O	各ガウス積分点の座標，重み係数
NCOL1, NCOL2	I	(100)	O	ソート用ワーク配列
SHAPE	R	(2,2,2,8)	O	各ガウス積分点における形状関数 N_i (i=1~8)
PNX, PNY, PNZ	R	(2,2,2,8)	O	各ガウス積分点における $\frac{\partial N_i}{\partial x}, \frac{\partial N_i}{\partial y}, \frac{\partial N_i}{\partial z} (i=1\sim 8)$
DETJ	R	(2,2,2)	O	各ガウス積分点におけるヤコビアン行列式
COND, QVOL	R		I	熱伝導率，体積当たり発熱量係数

マトリクス生成まで

- 一次元のときは，index，itemに関連した情報を簡単に作ることができた
  - 非ゼロ非対角成分の数は2
  - 番号が自分に対して：+1と-1

- 三次元の場合はもっと複雑
  - 非ゼロ非対角成分の数は7～26（現在の形状）
  - 実際はもっと複雑
  - 前以て，非ゼロ非対角成分数はわからない

movie

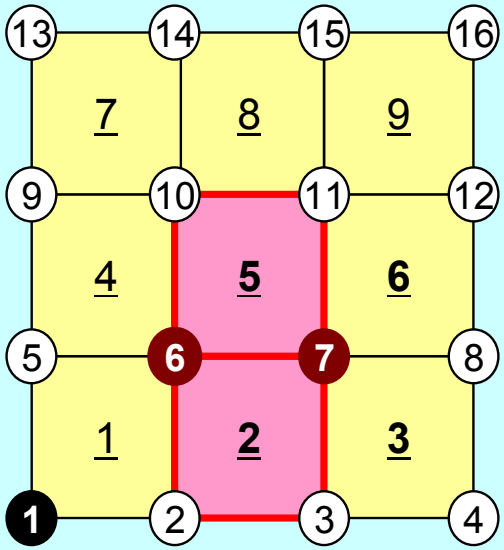
マトリクス生成まで

- 一次元のときは，index，itemに関連した情報を簡単に作ることができた
  - 非ゼロ非対角成分の数は2
  - 番号が自分に対して：+1と-1

- 三次元の場合はもっと複雑
  - 非ゼロ非対角成分の数は7～26（現在の形状）
  - 実際はもっと複雑
  - 前以て，非ゼロ非対角成分の数はわからない
- INLU(N)，IALU(N,NLU) を使って非ゼロ非対角成分数を予備的に勘定する

全体処理

```
program heat3D

use solver11
use pfem_util

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

call INPUT_CNTL
call INPUT_GRID

call MAT_CON0
call MAT_CON1

call MAT_ASS_MAIN
call MAT_ASS_BC

call SOLVE11

call OUTPUT_UCD

end program heat3D
```

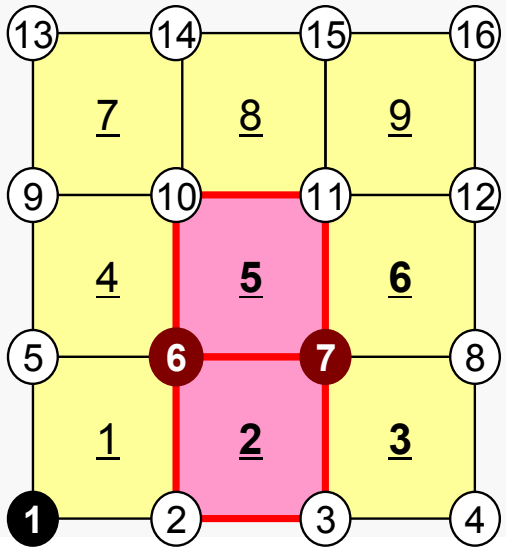


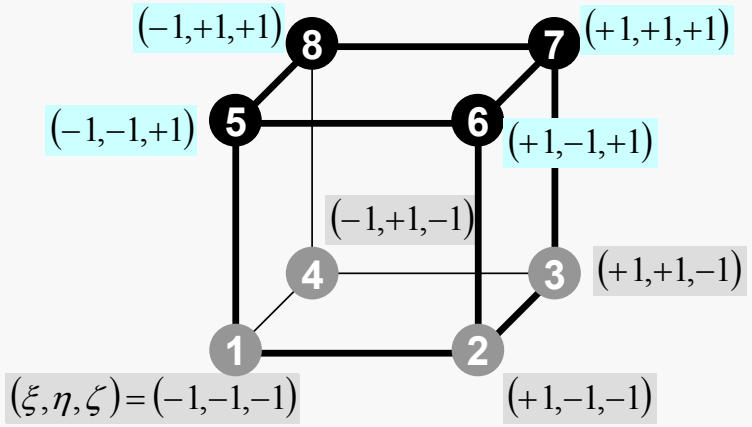
MAT_CON0: INU, IALU生成
MAT_CON1: index, item生成

とりあえず1から始まる節点番号を記憶

MAT_CON0：全体構成

```
do icel= 1, ICELTOT
  8節点相互の関係から，
  INLU, IALUを生成
  (FIND_NODE)
enddo
```





行列コネクティビティ生成：MAT_CON0（1/4）

```
!C
!C***
!C*** MAT_CON0
!C***
!C
      subroutine MAT_CON0
      use pfem_util
      implicit REAL*8 (A-H,O-Z)

      NLU= 26

      allocate (INLU(N), IALU(N,NLU))

      INLU= 0
      IALU= 0
```

NLU：
各節点における
非ゼロ非対角成分
の最大数
（接続する節点数）

今の問題の場合は
わかっているので，
このようにできる

不明の場合の実装：
⇒レポート課題

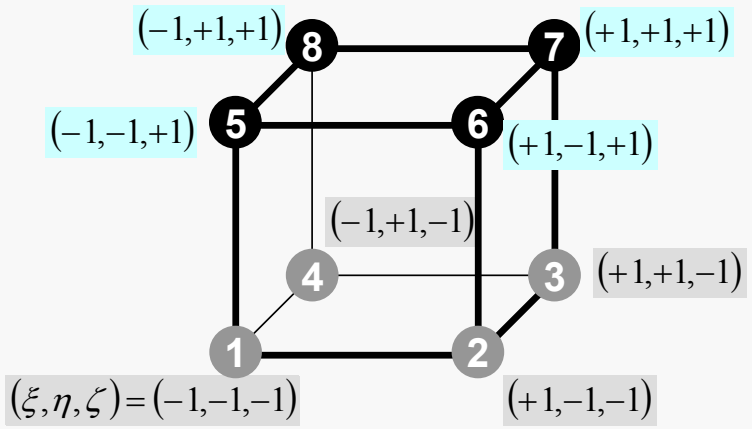
行列コネクティビティ生成：MAT_CON0（1/4）

```
!C
!C***
!C*** MAT_CON0
!C***
!C
      subroutine MAT_CON0
      use pfem_util
      implicit REAL*8 (A-H,O-Z)

      NLU= 26

      allocate (INLU(N), IALU(N,NLU))

      INLU= 0
      IALU= 0
```

変数名	サイズ	内　容
INLU	(N)	各節点の非零非対角成分数
IALU	(N,NLU)	各節点の非零非対角成分（列番号）

行列コネクティビティ生成：MAT_CON0（2/4）：1から始まる番号

```
      do icel= 1, ICELTOT
        in1= ICELNOD(icel,1)
        in2= ICELNOD(icel,2)
        in3= ICELNOD(icel,3)
        in4= ICELNOD(icel,4)
        in5= ICELNOD(icel,5)
        in6= ICELNOD(icel,6)
        in7= ICELNOD(icel,7)
        in8= ICELNOD(icel,8)

        call FIND_TS_NODE (in1,in2)
        call FIND_TS_NODE (in1,in3)
        call FIND_TS_NODE (in1,in4)
        call FIND_TS_NODE (in1,in5)
        call FIND_TS_NODE (in1,in6)
        call FIND_TS_NODE (in1,in7)
        call FIND_TS_NODE (in1,in8)

        call FIND_TS_NODE (in2,in1)
        call FIND_TS_NODE (in2,in3)
        call FIND_TS_NODE (in2,in4)
        call FIND_TS_NODE (in2,in5)
        call FIND_TS_NODE (in2,in6)
        call FIND_TS_NODE (in2,in7)
        call FIND_TS_NODE (in2,in8)

        call FIND_TS_NODE (in3,in1)
        call FIND_TS_NODE (in3,in2)
        call FIND_TS_NODE (in3,in4)
        call FIND_TS_NODE (in3,in5)
        call FIND_TS_NODE (in3,in6)
        call FIND_TS_NODE (in3,in7)
        call FIND_TS_NODE (in3,in8)
```



節点探索：FIND_TS_NODE

INLU,IAU探索：一次元ではこの部分は手動

```
!C
!C***
!C*** FIND_TS_NODE
!C***
!C
        subroutine FIND_TS_NODE (ip1,ip2)

          do kk= 1, INLU(ip1)
            if (ip2.eq.IALU(ip1,kk)) return
          enddo
          icou= INLU(ip1) + 1
          IALU(ip1,icou)= ip2
          INLU(ip1     )= icou
          return

        end subroutine FIND_TS_NODE
```

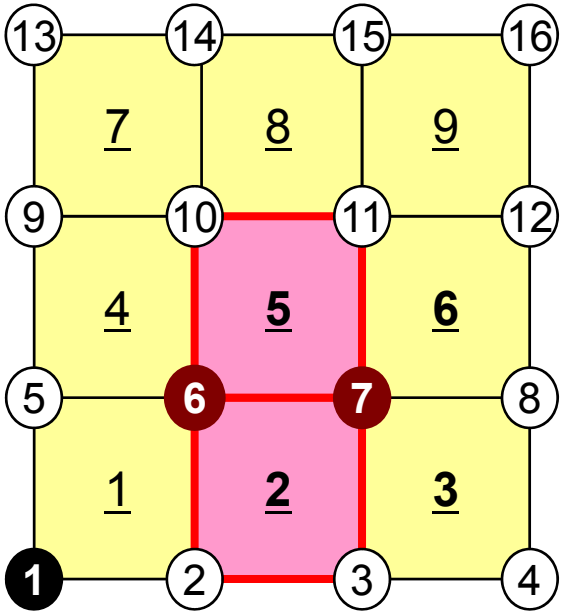
変数名	サイズ	内　容
INLU	(N)	各節点の非零非対角成分数
IALU	(N,NLU)	各節点の非零非対角成分（列番号）

節点探索：FIND_TS_NODE

一次元ではこの部分は手動

```
!C
!C***
!C*** FIND_TS_NODE
!C***
!C
        subroutine FIND_TS_NODE (ip1,ip2)

          do kk= 1, INLU(ip1)
            if (ip2.eq.IALU(ip1,kk)) return
          enddo
          icou= INLU(ip1) + 1
          IALU(ip1,icou)= ip2
          INLU(ip1     )= icou
          return

        end subroutine FIND_TS_NODE
```

既にIALUに含まれている場合は，次のペアへ

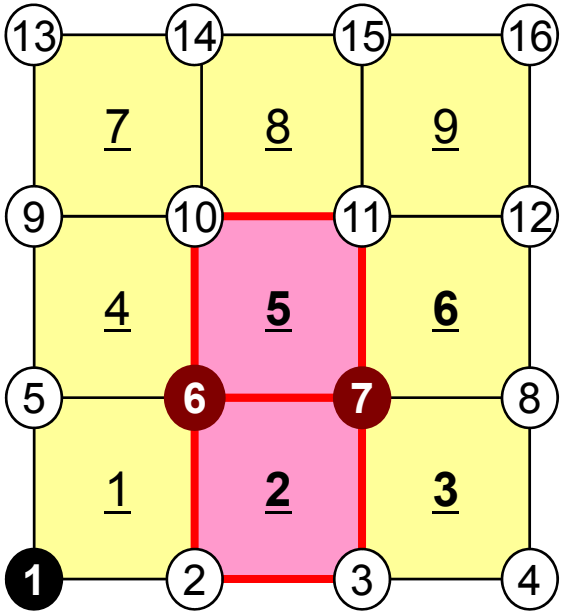


節点探索：FIND_TS_NODE

一次元ではこの部分は手動

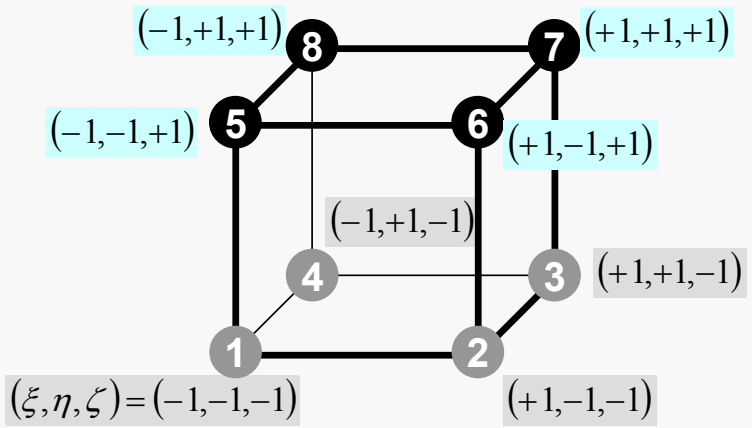
```
!C
!C***
!C*** FIND_TS_NODE
!C***
!C
        subroutine FIND_TS_NODE (ip1,ip2)

          do kk= 1, INLU(ip1)
            if (ip2.eq.IALU(ip1,kk)) return
          enddo
          icou= INLU(ip1) + 1
          IALU(ip1,icou)= ip2
          INLU(ip1     )= icou
          return

        end subroutine FIND_TS_NODE
```

IALUに含まれていない場合は，INLUに1を加えてIALUに格納



行列コネクティビティ生成：MAT_CON0（3/4）

```
      call FIND_TS_NODE (in4,in1)
      call FIND_TS_NODE (in4,in2)
      call FIND_TS_NODE (in4,in3)
      call FIND_TS_NODE (in4,in5)
      call FIND_TS_NODE (in4,in6)
      call FIND_TS_NODE (in4,in7)
      call FIND_TS_NODE (in4,in8)

      call FIND_TS_NODE (in5,in1)
      call FIND_TS_NODE (in5,in2)
      call FIND_TS_NODE (in5,in3)
      call FIND_TS_NODE (in5,in4)
      call FIND_TS_NODE (in5,in6)
      call FIND_TS_NODE (in5,in7)
      call FIND_TS_NODE (in5,in8)

      call FIND_TS_NODE (in6,in1)
      call FIND_TS_NODE (in6,in2)
      call FIND_TS_NODE (in6,in3)
      call FIND_TS_NODE (in6,in4)
      call FIND_TS_NODE (in6,in5)
      call FIND_TS_NODE (in6,in7)
      call FIND_TS_NODE (in6,in8)

      call FIND_TS_NODE (in7,in1)
      call FIND_TS_NODE (in7,in2)
      call FIND_TS_NODE (in7,in3)
      call FIND_TS_NODE (in7,in4)
      call FIND_TS_NODE (in7,in5)
      call FIND_TS_NODE (in7,in6)
      call FIND_TS_NODE (in7,in8)
```



行列コネクティビティ生成：MAT_CON0（4/4）

```
      call FIND_TS_NODE (in8,in1)
      call FIND_TS_NODE (in8,in2)
      call FIND_TS_NODE (in8,in3)
      call FIND_TS_NODE (in8,in4)
      call FIND_TS_NODE (in8,in5)
      call FIND_TS_NODE (in8,in6)
      call FIND_TS_NODE (in8,in7)
    enddo

    do in= 1, N
      NN= INLU(in)
      do k= 1, NN
        NCOL1(k)= IALU(in,k)
      enddo
      call mSORT (NCOL1, NCOL2, NN)
      do k= NN, 1, -1
        IALU(in,NN-k+1)= NCOL1(NCOL2(k))
      enddo
    enddo
```

各節点において，
IALU(i,k)が小さい番号から
大きい番号に並ぶようにソート
（単純なバブルソート）
せいぜい100程度のものをソートする

CRS形式への変換：MAT_CON1

```
!C
!C***
!C*** MAT_CON1
!C***
!C
      subroutine MAT_CON1
      use pfem_util
      implicit REAL*8 (A-H,O-Z)

      allocate (index(0:N))
      index= 0

      do i= 1, N
        index(i)= index(i-1) + INLU(i)
      enddo

      NPLU= index(N)

      allocate (item(NPLU))

      do i= 1, N
        do k= 1, INLU(i)
              kk = k + index(i-1)
          item(kk)=      IALU(i,k)
        enddo
      enddo

      deallocate (INLU, IALU)

      end subroutine MAT_CON1
```

C

$$\mathrm{index}[i+1] = \sum_{k=0}^{i} \mathrm{INLU}[k]$$

$$\mathrm{index}[0] = 0$$

FORTRAN

$$\mathrm{index}(i) = \sum_{k=1}^{i} \mathrm{INLU}(k)$$

$$\mathrm{index}(0) = 0$$

CRS形式への変換：MAT_CON1

```
!C
!C***
!C*** MAT_CON1
!C***
!C
      subroutine MAT_CON1
      use pfem_util
      implicit REAL*8 (A-H,O-Z)

      allocate (index(0:N))
      index= 0

      do i= 1, N
        index(i)= index(i-1) + INLU(i)
      enddo

      NPLU= index(N)

      allocate (item(NPLU))

      do i= 1, N
        do k= 1, INLU(i)
               kk = k + index(i-1)
          item(kk)=      IALU(i,k)
        enddo
      enddo

      deallocate (INLU, IALU)

      end subroutine MAT_CON1
```

NPLU=index(N)
itemのサイズ
非ゼロ非対角成分総数

CRS形式への変換：MAT_CON1

```
!C
!C***
!C*** MAT_CON1
!C***
!C
      subroutine MAT_CON1
      use pfem_util
      implicit REAL*8 (A-H,O-Z)

      allocate (index(0:N))
      index= 0

      do i= 1, N
        index(i)= index(i-1) + INLU(i)
      enddo

      NPLU= index(N)

      allocate (item(NPLU))

      do i= 1, N
        do k= 1, INLU(i)
              kk = k + index(i-1)
          item(kk)=      IALU(i,k)
        enddo
      enddo

      deallocate (INLU, IALU)

      end subroutine MAT_CON1
```

itemに1から始まる節点番号を記憶

CRS形式への変換：MAT_CON1

```
!C
!C***
!C*** MAT_CON1
!C***
!C
      subroutine MAT_CON1
      use pfem_util
      implicit REAL*8 (A-H,O-Z)

      allocate (index(0:N))
      index= 0

      do i= 1, N
        index(i)= index(i-1) + INLU(i)
      enddo

      NPLU= index(N)

      allocate (item(NPLU))

      do i= 1, N
        do k= 1, INLU(i)
              kk = k + index(i-1)
          item(kk)=      IALU(i,k)
        enddo
      enddo

      deallocate (INLU, IALU)

      end subroutine MAT_CON1
```

これらはもはや不要

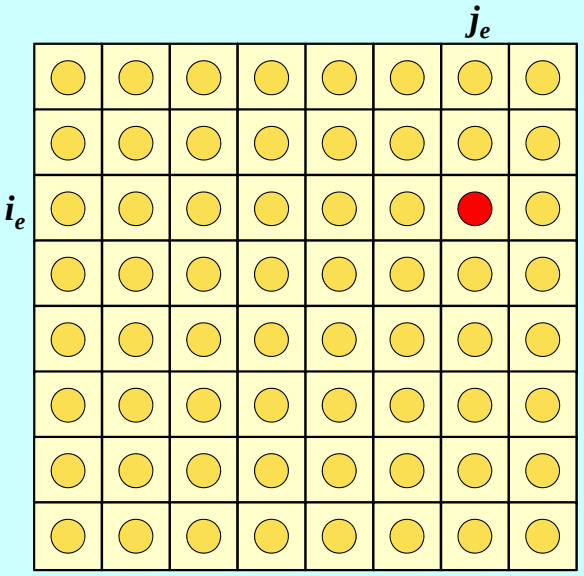
全体処理

```
      program heat3D

      use solver11
      use pfem_util

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

      call INPUT_CNTL
      call INPUT_GRID

      call MAT_CON0
      call MAT_CON1

      call MAT_ASS_MAIN
      call MAT_ASS_BC

      call SOLVE11

      call OUTPUT_UCD

      end program heat3D
```

MAT_ASS_MAIN：全体構成

```
do kpn= 1, 2          ガウス積分点番号（ζ方向）
  do jpn= 1, 2        ガウス積分点番号（η方向）
    do ipn= 1, 2      ガウス積分点番号（ξ方向）
      ガウス積分点（8個）における形状関数，
      およびその「自然座標系」における微分の算出
    enddo
  enddo
enddo
```

```
do icel= 1, ICELTOT    要素ループ
  8節点の座標から，ガウス積分点における，形状関数の「全体座標系」における微分，
  およびヤコビアンを算出（JACOBI）

  do ie= 1, 8          局所節点番号
    do je= 1, 8        局所節点番号
      全体節点番号：ip，jp
      Aip,jpのitemにおけるアドレス：kk

      do kpn= 1, 2       ガウス積分点番号（ζ方向）
        do jpn= 1, 2     ガウス積分点番号（η方向）
          do ipn= 1, 2   ガウス積分点番号（ξ方向）
            要素積分⇒要素行列成分計算，全体行列への足しこみ
          enddo
        enddo
      enddo
    enddo
  enddo
enddo
```



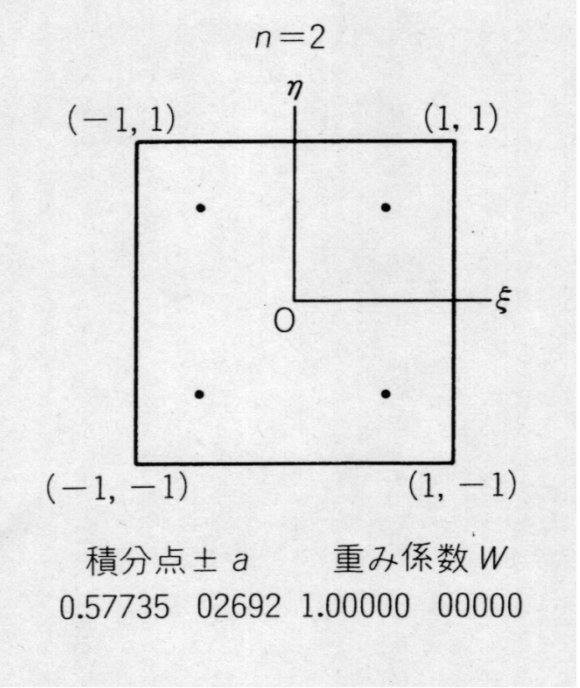
係数行列：MAT_ASS_MAIN（1/6）

```
!C
!C***
!C*** MAT_ASS_MAIN
!C***
!C
      subroutine MAT_ASS_MAIN
      use pfem_util
      implicit REAL*8 (A-H,O-Z)
      integer(kind=kint), dimension(  8) :: nodLOCAL

      allocate (AMAT(NPLU))
      allocate (B(N), D(N), X(N))

      AMAT= 0.d0                        係数行列（非零非対角成分）
         B= 0.d0                        右辺ベクトル
         X= 0.d0                        未知数ベクトル
         D= 0.d0                        係数行列（対角成分）

      WEI(1)= +1.0000000000D+00
      WEI(2)= +1.0000000000D+00

      POS(1)= -0.5773502692D+00
      POS(2)= +0.5773502692D+00
```

係数行列：MAT_ASS_MAIN（1/6）

```
!C
!C***
!C*** MAT_ASS_MAIN
!C***
!C
      subroutine MAT_ASS_MAIN
      use pfem_util
      implicit REAL*8 (A-H,O-Z)
      integer(kind=kint), dimension(  8) :: nodLOCAL

      allocate (AMAT(NPLU))
      allocate (B(N), D(N), X(N))

      AMAT= 0.d0
         B= 0.d0
         X= 0.d0
         D= 0.d0

      WEI(1)= +1.0000000000D+00
      WEI(2)= +1.0000000000D+00

      POS(1)= -0.5773502692D+00
      POS(2)= +0.5773502692D+00
```

POS: 積分点座標
WEI: 重み係数



係数行列：MAT_ASS_MAIN（2/6）

```
!C
!C-- INIT.
!C     PNQ   - 1st-order derivative of shape function by QSI
!C     PNE   - 1st-order derivative of shape function by ETA
!C     PNT   - 1st-order derivative of shape function by ZET
!C

      do kp= 1, 2
      do jp= 1, 2
      do ip= 1, 2

        QP1= 1.d0 + POS(ip)
        QM1= 1.d0 - POS(ip)
        EP1= 1.d0 + POS(jp)
        EM1= 1.d0 - POS(jp)
        TP1= 1.d0 + POS(kp)
        TM1= 1.d0 - POS(kp)

        SHAPE(ip,jp,kp,1)= 08th * QM1 * EM1 * TM1
        SHAPE(ip,jp,kp,2)= 08th * QP1 * EM1 * TM1
        SHAPE(ip,jp,kp,3)= 08th * QP1 * EP1 * TM1
        SHAPE(ip,jp,kp,4)= 08th * QM1 * EP1 * TM1
        SHAPE(ip,jp,kp,5)= 08th * QM1 * EM1 * TP1
        SHAPE(ip,jp,kp,6)= 08th * QP1 * EM1 * TP1
        SHAPE(ip,jp,kp,7)= 08th * QP1 * EP1 * TP1
        SHAPE(ip,jp,kp,8)= 08th * QM1 * EP1 * TP1
```

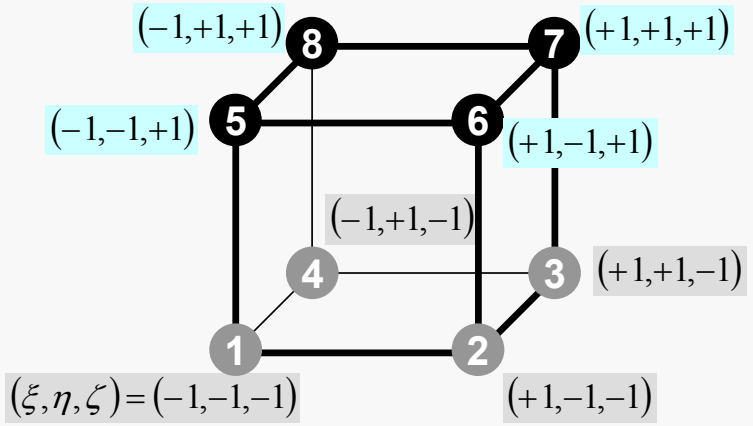
係数行列：MAT_ASS_MAIN（2/6）

```
!C
!C-- INIT.
!C     PNQ   - 1st-order derivative of shape function by QSI
!C     PNE   - 1st-order derivative of shape function by ETA
!C     PNT   - 1st-order derivative of shape function by ZET
!C

      do kp= 1, 2
      do jp= 1, 2
      do ip= 1, 2

        QP1= 1.d0 + POS(ip)
        QM1= 1.d0 - POS(ip)
        EP1= 1.d0 + POS(jp)
        EM1= 1.d0 - POS(jp)
        TP1= 1.d0 + POS(kp)
        TM1= 1.d0 - POS(kp)

        SHAPE(ip,jp,kp,1)= 08th * QM1 * EM1 * TM1
        SHAPE(ip,jp,kp,2)= 08th * QP1 * EM1 * TM1
        SHAPE(ip,jp,kp,3)= 08th * QP1 * EP1 * TM1
        SHAPE(ip,jp,kp,4)= 08th * QM1 * EP1 * TM1
        SHAPE(ip,jp,kp,5)= 08th * QM1 * EM1 * TP1
        SHAPE(ip,jp,kp,6)= 08th * QP1 * EM1 * TP1
        SHAPE(ip,jp,kp,7)= 08th * QP1 * EP1 * TP1
        SHAPE(ip,jp,kp,8)= 08th * QM1 * EP1 * TP1
```

$$\mathrm{QP1(i)} = (1+\xi_i), \quad \mathrm{QM1(i)} = (1-\xi_i)$$
$$\mathrm{EP1(j)} = (1+\eta_j), \quad \mathrm{EM1(j)} = (1-\eta_i)$$
$$\mathrm{TP1(k)} = (1+\zeta_k), \quad \mathrm{TM1(k)} = (1-\zeta_k)$$

係数行列：MAT_ASS_MAIN（2/6）

```
!C
!C-- INIT.
!C     PNQ   - 1st-order derivative of shape function by QSI
!C     PNE   - 1st-order derivative of shape function by ETA
!C     PNT   - 1st-order derivative of shape function by ZET
!C

      do kp= 1, 2
      do jp= 1, 2
      do ip= 1, 2

        QP1= 1.d0 + POS(ip)
        QM1= 1.d0 - POS(ip)
        EP1= 1.d0 + POS(jp)
        EM1= 1.d0 - POS(jp)
        TP1= 1.d0 + POS(kp)
        TM1= 1.d0 - POS(kp)

        SHAPE(ip,jp,kp,1)= 08th * QM1 * EM1 * TM1
        SHAPE(ip,jp,kp,2)= 08th * QP1 * EM1 * TM1
        SHAPE(ip,jp,kp,3)= 08th * QP1 * EP1 * TM1
        SHAPE(ip,jp,kp,4)= 08th * QM1 * EP1 * TM1
        SHAPE(ip,jp,kp,5)= 08th * QM1 * EM1 * TP1
        SHAPE(ip,jp,kp,6)= 08th * QP1 * EM1 * TP1
        SHAPE(ip,jp,kp,7)= 08th * QP1 * EP1 * TP1
        SHAPE(ip,jp,kp,8)= 08th * QM1 * EP1 * TP1
```



係数行列：MAT_ASS_MAIN（2/6）

```
!C
!C-- INIT.
!C     PNQ   - 1st-order derivative of shape function by QSI
!C     PNE   - 1st-order derivative of shape function by ETA
!C     PNT   - 1st-order derivative of shape function by ZET
!C

      do kp= 1, 2
      do jp= 1, 2
      do ip= 1, 2

        QP1= 1.d0 + POS(ip)
        QM1= 1.d0 - POS(ip)
        EP1= 1.d0 + POS(jp)
        EM1= 1.d0 - POS(jp)
        TP1= 1.d0 + POS(kp)
        TM1= 1.d0 - POS(kp)

        SHAPE(ip,jp,kp,1)= 08th * QM1 * EM1 * TM1
        SHAPE(ip,jp,kp,2)= 08th * QP1 * EM1 * TM1
        SHAPE(ip,jp,kp,3)= 08th * QP1 * EP1 * TM1
        SHAPE(ip,jp,kp,4)= 08th * QM1 * EP1 * TM1
        SHAPE(ip,jp,kp,5)= 08th * QM1 * EM1 * TP1
        SHAPE(ip,jp,kp,6)= 08th * QP1 * EM1 * TP1
        SHAPE(ip,jp,kp,7)= 08th * QP1 * EP1 * TP1
        SHAPE(ip,jp,kp,8)= 08th * QM1 * EP1 * TP1
```

$$N_1(\xi,\eta,\zeta)=\frac{1}{8}(1-\xi)(1-\eta)(1-\zeta)$$

$$N_2(\xi,\eta,\zeta)=\frac{1}{8}(1+\xi)(1-\eta)(1-\zeta)$$

$$N_3(\xi,\eta,\zeta)=\frac{1}{8}(1+\xi)(1+\eta)(1-\zeta)$$

$$N_4(\xi,\eta,\zeta)=\frac{1}{8}(1-\xi)(1+\eta)(1-\zeta)$$

$$N_5(\xi,\eta,\zeta)=\frac{1}{8}(1-\xi)(1-\eta)(1+\zeta)$$

$$N_6(\xi,\eta,\zeta)=\frac{1}{8}(1+\xi)(1-\eta)(1+\zeta)$$

$$N_7(\xi,\eta,\zeta)=\frac{1}{8}(1+\xi)(1+\eta)(1+\zeta)$$

$$N_8(\xi,\eta,\zeta)=\frac{1}{8}(1-\xi)(1+\eta)(1+\zeta)$$

係数行列：MAT_ASS_MAIN（3/6）

```
      PNQ(jp,kp,1)= - 08th * EM1 * TM1
      PNQ(jp,kp,2)= + 08th * EM1 * TM1
      PNQ(jp,kp,3)= + 08th * EP1 * TM1
      PNQ(jp,kp,4)= - 08th * EP1 * TM1
      PNQ(jp,kp,5)= - 08th * EM1 * TP1
      PNQ(jp,kp,6)= + 08th * EM1 * TP1
      PNQ(jp,kp,7)= + 08th * EP1 * TP1
      PNQ(jp,kp,8)= - 08th * EP1 * TP1
      PNE(ip,kp,1)= - 08th * QM1 * TM1
      PNE(ip,kp,2)= - 08th * QP1 * TM1
      PNE(ip,kp,3)= + 08th * QP1 * TM1
      PNE(ip,kp,4)= + 08th * QM1 * TM1
      PNE(ip,kp,5)= - 08th * QM1 * TP1
      PNE(ip,kp,6)= - 08th * QP1 * TP1
      PNE(ip,kp,7)= + 08th * QP1 * TP1
      PNE(ip,kp,8)= + 08th * QM1 * TP1
      PNT(ip,jp,1)= - 08th * QM1 * EM1
      PNT(ip,jp,2)= - 08th * QP1 * EM1
      PNT(ip,jp,3)= - 08th * QP1 * EP1
      PNT(ip,jp,4)= - 08th * QM1 * EP1
      PNT(ip,jp,5)= + 08th * QM1 * EM1
      PNT(ip,jp,6)= + 08th * QP1 * EM1
      PNT(ip,jp,7)= + 08th * QP1 * EP1
      PNT(ip,jp,8)= + 08th * QM1 * EP1
    enddo
    enddo
    enddo

    do icel= 1, ICELTOT
      CONDO= COND

      in1= ICELNOD(icel,1)
      in2= ICELNOD(icel,2)
      in3= ICELNOD(icel,3)
      in4= ICELNOD(icel,4)
      in5= ICELNOD(icel,5)
      in6= ICELNOD(icel,6)
      in7= ICELNOD(icel,7)
      in8= ICELNOD(icel,8)
```

$$PNQ(j,k)=\frac{\partial N_l}{\partial \xi}(\xi=\xi_i,\eta=\eta_j,\zeta=\zeta_k)$$

$$PNE(i,k)=\frac{\partial N_l}{\partial \eta}(\xi=\xi_i,\eta=\eta_j,\zeta=\zeta_k)$$

$$PNT(i,j)=\frac{\partial N_l}{\partial \zeta}(\xi=\xi_i,\eta=\eta_j,\zeta=\zeta_k)$$

$$\frac{\partial N_1}{\partial \xi}(\xi_i,\eta_j,\zeta_k)=-\frac{1}{8}(1-\eta_j)(1-\zeta_k)$$

$$\frac{\partial N_2}{\partial \xi}(\xi_i,\eta_j,\zeta_k)=+\frac{1}{8}(1-\eta_j)(1-\zeta_k)$$

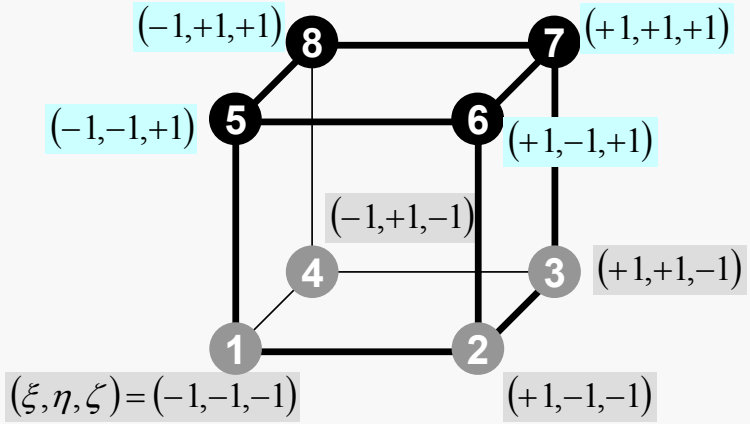
$$\frac{\partial N_3}{\partial \xi}(\xi_i,\eta_j,\zeta_k)=+\frac{1}{8}(1+\eta_j)(1-\zeta_k)$$

$$\frac{\partial N_3}{\partial \xi}(\xi_i,\eta_j,\zeta_k)=-\frac{1}{8}(1+\eta_j)(1-\zeta_k)$$

(ξ_i,η_j,ζ_k) における形状関数の一階微分

係数行列：MAT_ASS_MAIN（3/6）

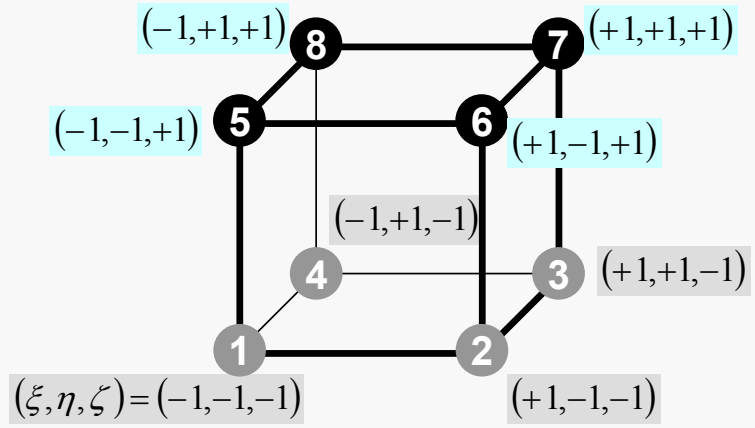
```
      PNQ(jp,kp,1)= - 08th * EM1 * TM1
      PNQ(jp,kp,2)= + 08th * EM1 * TM1
      PNQ(jp,kp,3)= + 08th * EP1 * TM1
      PNQ(jp,kp,4)= - 08th * EP1 * TM1
      PNQ(jp,kp,5)= - 08th * EM1 * TP1
      PNQ(jp,kp,6)= + 08th * EM1 * TP1
      PNQ(jp,kp,7)= + 08th * EP1 * TP1
      PNQ(jp,kp,8)= - 08th * EP1 * TP1
      PNE(ip,kp,1)= - 08th * QM1 * TM1
      PNE(ip,kp,2)= - 08th * QP1 * TM1
      PNE(ip,kp,3)= + 08th * QP1 * TM1
      PNE(ip,kp,4)= + 08th * QM1 * TM1
      PNE(ip,kp,5)= - 08th * QM1 * TP1
      PNE(ip,kp,6)= - 08th * QP1 * TP1
      PNE(ip,kp,7)= + 08th * QP1 * TP1
      PNE(ip,kp,8)= + 08th * QM1 * TP1
      PNT(ip,jp,1)= - 08th * QM1 * EM1
      PNT(ip,jp,2)= - 08th * QP1 * EM1
      PNT(ip,jp,3)= - 08th * QP1 * EP1
      PNT(ip,jp,4)= - 08th * QM1 * EP1
      PNT(ip,jp,5)= + 08th * QM1 * EM1
      PNT(ip,jp,6)= + 08th * QP1 * EM1
      PNT(ip,jp,7)= + 08th * QP1 * EP1
      PNT(ip,jp,8)= + 08th * QM1 * EP1
    enddo
    enddo
    enddo

    do icel= 1, ICELTOT
      CONDO= COND

      in1= ICELNOD(icel,1)
      in2= ICELNOD(icel,2)
      in3= ICELNOD(icel,3)
      in4= ICELNOD(icel,4)
      in5= ICELNOD(icel,5)
      in6= ICELNOD(icel,6)
      in7= ICELNOD(icel,7)
      in8= ICELNOD(icel,8)
```



係数行列：MAT_ASS_MAIN（4/6）

```
      nodLOCAL(1)= in1
      nodLOCAL(2)= in2
      nodLOCAL(3)= in3
      nodLOCAL(4)= in4
      nodLOCAL(5)= in5
      nodLOCAL(6)= in6
      nodLOCAL(7)= in7
      nodLOCAL(8)= in8

      X1= XYZ(in1,1)
      X2= XYZ(in2,1)
      X3= XYZ(in3,1)
      X4= XYZ(in4,1)
      X5= XYZ(in5,1)
      X6= XYZ(in6,1)
      X7= XYZ(in7,1)
      X8= XYZ(in8,1)
      Y1= XYZ(in1,2)
      Y2= XYZ(in2,2)
      Y3= XYZ(in3,2)
      Y4= XYZ(in4,2)
      Y5= XYZ(in5,2)
      Y6= XYZ(in6,2)
      Y7= XYZ(in7,2)
      Y8= XYZ(in8,2)
      QVC= O8th * (X1+X2+X3+X4+X5+X6+X7+X8+
     &             Y1+Y2+Y3+Y4+Y5+Y6+Y7+Y8)
      Z1= XYZ(in1,3)
      Z2= XYZ(in2,3)
      Z3= XYZ(in3,3)
      Z4= XYZ(in4,3)
      Z5= XYZ(in5,3)
      Z6= XYZ(in6,3)
      Z7= XYZ(in7,3)
      Z8= XYZ(in8,3)

      call JACOBI (DETJ, PNQ, PNE, PNT, PNX, PNY, PNZ,              &
     &             X1, X2, X3, X4, X5, X6, X7, X8,                  &
     &             Y1, Y2, Y3, Y4, Y5, Y6, Y7, Y8,                  &
     &             Z1, Z2, Z3, Z4, Z5, Z6, Z7, Z8 )
```

8節点の節点番号



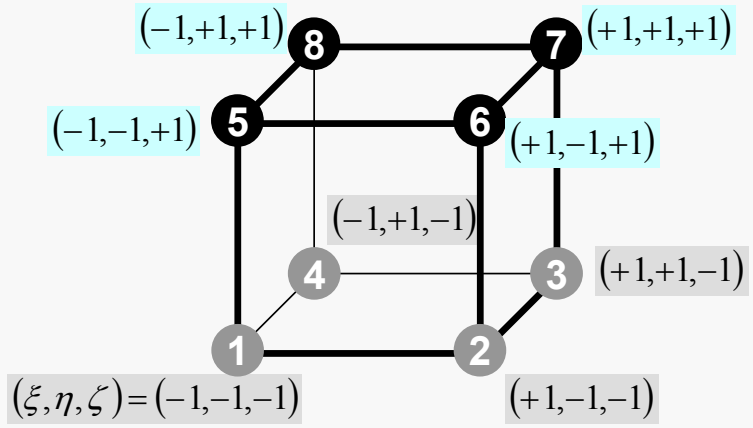
係数行列：MAT_ASS_MAIN（4/6）

```
      nodLOCAL(1)= in1
      nodLOCAL(2)= in2
      nodLOCAL(3)= in3
      nodLOCAL(4)= in4
      nodLOCAL(5)= in5
      nodLOCAL(6)= in6
      nodLOCAL(7)= in7
      nodLOCAL(8)= in8

      X1= XYZ(in1,1)
      X2= XYZ(in2,1)
      X3= XYZ(in3,1)
      X4= XYZ(in4,1)
      X5= XYZ(in5,1)
      X6= XYZ(in6,1)
      X7= XYZ(in7,1)
      X8= XYZ(in8,1)
      Y1= XYZ(in1,2)
      Y2= XYZ(in2,2)
      Y3= XYZ(in3,2)
      Y4= XYZ(in4,2)
      Y5= XYZ(in5,2)
      Y6= XYZ(in6,2)
      Y7= XYZ(in7,2)
      Y8= XYZ(in8,2)
      QVC= O8th * (X1+X2+X3+X4+X5+X6+X7+X8+
     &             Y1+Y2+Y3+Y4+Y5+Y6+Y7+Y8)
      Z1= XYZ(in1,3)
      Z2= XYZ(in2,3)
      Z3= XYZ(in3,3)
      Z4= XYZ(in4,3)
      Z5= XYZ(in5,3)
      Z6= XYZ(in6,3)
      Z7= XYZ(in7,3)
      Z8= XYZ(in8,3)

      call JACOBI (DETJ, PNQ, PNE, PNT, PNX, PNY, PNZ,              &
     &             X1, X2, X3, X4, X5, X6, X7, X8,                  &
     &             Y1, Y2, Y3, Y4, Y5, Y6, Y7, Y8,                  &
     &             Z1, Z2, Z3, Z4, Z5, Z6, Z7, Z8 )
```

8節点のX座標

8節点のY座標

8節点のZ座標

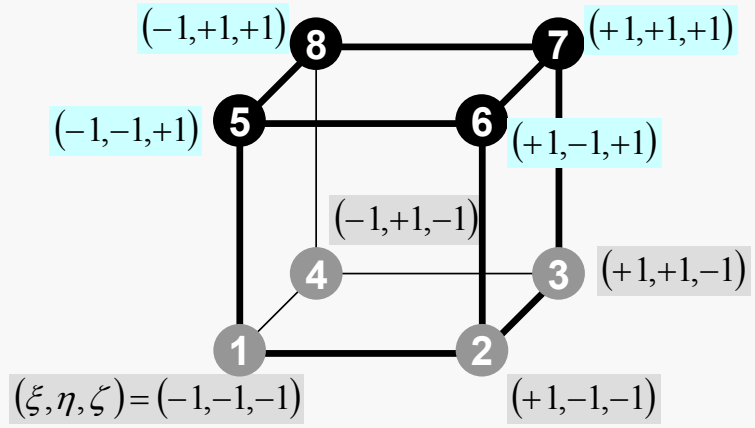


係数行列：MAT_ASS_MAIN（4/6）

```
      nodLOCAL(1)= in1
      nodLOCAL(2)= in2
      nodLOCAL(3)= in3
      nodLOCAL(4)= in4
      nodLOCAL(5)= in5
      nodLOCAL(6)= in6
      nodLOCAL(7)= in7
      nodLOCAL(8)= in8

      X1= XYZ(in1,1)
      X2= XYZ(in2,1)
      X3= XYZ(in3,1)
      X4= XYZ(in4,1)
      X5= XYZ(in5,1)
      X6= XYZ(in6,1)
      X7= XYZ(in7,1)
      X8= XYZ(in8,1)
      Y1= XYZ(in1,2)
      Y2= XYZ(in2,2)
      Y3= XYZ(in3,2)
      Y4= XYZ(in4,2)
      Y5= XYZ(in5,2)
      Y6= XYZ(in6,2)
      Y7= XYZ(in7,2)
      Y8= XYZ(in8,2)
      QVC= 08th * (X1+X2+X3+X4+X5+X6+X7+X8+
     &             Y1+Y2+Y3+Y4+Y5+Y6+Y7+Y8)
      Z1= XYZ(in1,3)
      Z2= XYZ(in2,3)
      Z3= XYZ(in3,3)
      Z4= XYZ(in4,3)
      Z5= XYZ(in5,3)
      Z6= XYZ(in6,3)
      Z7= XYZ(in7,3)
      Z8= XYZ(in8,3)

      call JACOBI (DETJ, PNQ, PNE, PNT, PNX, PNY, PNZ,              &
     &             X1, X2, X3, X4, X5, X6, X7, X8,                  &
     &             Y1, Y2, Y3, Y4, Y5, Y6, Y7, Y8,                  &
     &             Z1, Z2, Z3, Z4, Z5, Z6, Z7, Z8 )
```

8節点のX座標

8節点のY座標



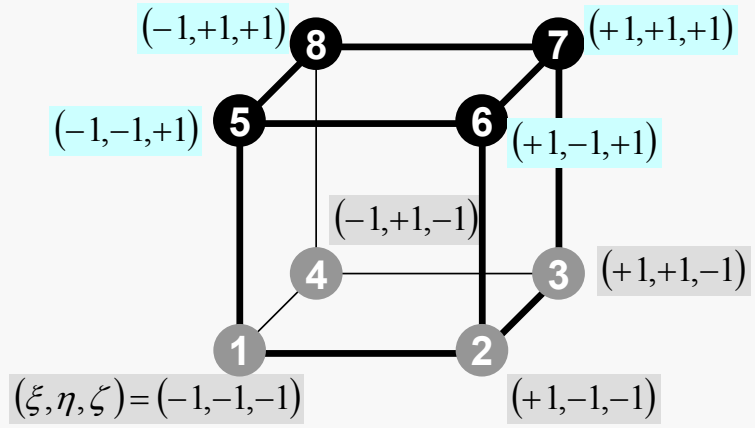
$$\frac{\partial}{\partial x}\left(\lambda\frac{\partial T}{\partial x}\right)+\frac{\partial}{\partial y}\left(\lambda\frac{\partial T}{\partial y}\right)+\frac{\partial}{\partial z}\left(\lambda\frac{\partial T}{\partial z}\right)+\dot{Q}(x,y,z)=0$$

$$\dot{Q}(x,y,z)=QVOL\left|x_C+y_C\right|$$

体積当たり発熱量は位置（メッシュの中心の座標 x_c,y_c）に依存

係数行列：MAT_ASS_MAIN（4/6）

```
      nodLOCAL(1)= in1
      nodLOCAL(2)= in2
      nodLOCAL(3)= in3
      nodLOCAL(4)= in4
      nodLOCAL(5)= in5
      nodLOCAL(6)= in6
      nodLOCAL(7)= in7
      nodLOCAL(8)= in8

      X1= XYZ(in1,1)
      X2= XYZ(in2,1)
      X3= XYZ(in3,1)
      X4= XYZ(in4,1)
      X5= XYZ(in5,1)
      X6= XYZ(in6,1)
      X7= XYZ(in7,1)
      X8= XYZ(in8,1)
      Y1= XYZ(in1,2)
      Y2= XYZ(in2,2)
      Y3= XYZ(in3,2)
      Y4= XYZ(in4,2)
      Y5= XYZ(in5,2)
      Y6= XYZ(in6,2)
      Y7= XYZ(in7,2)
      Y8= XYZ(in8,2)
      QVC= 08th * (X1+X2+X3+X4+X5+X6+X7+X8+
     &             Y1+Y2+Y3+Y4+Y5+Y6+Y7+Y8)
      Z1= XYZ(in1,3)
      Z2= XYZ(in2,3)
      Z3= XYZ(in3,3)
      Z4= XYZ(in4,3)
      Z5= XYZ(in5,3)
      Z6= XYZ(in6,3)
      Z7= XYZ(in7,3)
      Z8= XYZ(in8,3)

      call JACOBI (DETJ, PNQ, PNE, PNT, PNX, PNY, PNZ,              &
     &             X1, X2, X3, X4, X5, X6, X7, X8,                  &
     &             Y1, Y2, Y3, Y4, Y5, Y6, Y7, Y8,                  &
     &             Z1, Z2, Z3, Z4, Z5, Z6, Z7, Z8 )
```



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

$$\dot{Q}(x,y,z)=QVOL\left|x_C+y_C\right|$$

$$QVC=\left|x_C+y_C\right|$$

係数行列：MAT_ASS_MAIN（4/6）

```
      nodLOCAL(1)= in1
      nodLOCAL(2)= in2
      nodLOCAL(3)= in3
      nodLOCAL(4)= in4
      nodLOCAL(5)= in5
      nodLOCAL(6)= in6
      nodLOCAL(7)= in7
      nodLOCAL(8)= in8

      X1= XYZ(in1,1)
      X2= XYZ(in2,1)
      X3= XYZ(in3,1)
      X4= XYZ(in4,1)
      X5= XYZ(in5,1)
      X6= XYZ(in6,1)
      X7= XYZ(in7,1)
      X8= XYZ(in8,1)
      Y1= XYZ(in1,2)
      Y2= XYZ(in2,2)
      Y3= XYZ(in3,2)
      Y4= XYZ(in4,2)
      Y5= XYZ(in5,2)
      Y6= XYZ(in6,2)
      Y7= XYZ(in7,2)
      Y8= XYZ(in8,2)
      QVC= O8th * (X1+X2+X3+X4+X5+X6+X7+X8+
     &             Y1+Y2+Y3+Y4+Y5+Y6+Y7+Y8)
      Z1= XYZ(in1,3)
      Z2= XYZ(in2,3)
      Z3= XYZ(in3,3)
      Z4= XYZ(in4,3)
      Z5= XYZ(in5,3)
      Z6= XYZ(in6,3)
      Z7= XYZ(in7,3)
      Z8= XYZ(in8,3)

      call JACOBI (DETJ, PNQ, PNE, PNT, PNX, PNY, PNZ,              &
     &             X1, X2, X3, X4, X5, X6, X7, X8,                  &
     &             Y1, Y2, Y3, Y4, Y5, Y6, Y7, Y8,                  &
     &             Z1, Z2, Z3, Z4, Z5, Z6, Z7, Z8 )
```

JACOBI（1/4）

```
      subroutine JACOBI (DETJ, PNQ, PNE, PNT, PNX, PNY, PNZ,             &
     &  X1, X2, X3, X4, X5, X6, X7, X8, Y1, Y2, Y3, Y4, Y5, Y6, Y7, Y8, &
     &  Z1, Z2, Z3, Z4, Z5, Z6, Z7, Z8 )

!C
!C    calculates JACOBIAN & INVERSE JACOBIAN
!C              dNi/dx, dNi/dy & dNi/dz
!C

      implicit REAL*8 (A-H,O-Z)
      dimension DETJ(2,2,2)
      dimension PNQ(2,2,8),   PNE(2,2,8),   PNT(2,2,8)
      dimension PNX(2,2,2,8), PNY(2,2,2,8), PNZ(2,2,2,8)

      do kp= 1, 2
      do jp= 1, 2
      do ip= 1, 2
        PNX(ip,jp,kp,1)=0.d0
        PNX(ip,jp,kp,2)=0.d0
        PNX(ip,jp,kp,3)=0.d0
        PNX(ip,jp,kp,4)=0.d0
        PNX(ip,jp,kp,5)=0.d0
        PNX(ip,jp,kp,6)=0.d0
        PNX(ip,jp,kp,7)=0.d0
        PNX(ip,jp,kp,8)=0.d0
        PNY(ip,jp,kp,1)=0.d0
        PNY(ip,jp,kp,2)=0.d0
        PNY(ip,jp,kp,3)=0.d0
        PNY(ip,jp,kp,4)=0.d0
        PNY(ip,jp,kp,5)=0.d0
        PNY(ip,jp,kp,6)=0.d0
        PNY(ip,jp,kp,7)=0.d0
        PNY(ip,jp,kp,8)=0.d0
        PNZ(ip,jp,kp,1)=0.d0
        PNZ(ip,jp,kp,2)=0.d0
        PNZ(ip,jp,kp,3)=0.d0
        PNZ(ip,jp,kp,4)=0.d0
        PNZ(ip,jp,kp,5)=0.d0
        PNZ(ip,jp,kp,6)=0.d0
        PNZ(ip,jp,kp,7)=0.d0
        PNZ(ip,jp,kp,8)=0.d0
```

入力 $\left[\frac{\partial N_l}{\partial \xi}, \frac{\partial N_l}{\partial \eta}, \frac{\partial N_l}{\partial \zeta}\right], (x_l, y_l, z_l) (l = 1 \sim 8)$

出力 $\left[\frac{\partial N_l}{\partial x}, \frac{\partial N_l}{\partial y}, \frac{\partial N_l}{\partial z}\right], \det|J|$

各ガウス積分点(ip,jp,kp)における値

自然座標系における偏微分（1/4）

- 偏微分の公式より以下のようになる：

$$\frac{\partial N_i(\xi,\eta,\zeta)}{\partial \xi} = \frac{\partial N_i}{\partial x}\frac{\partial x}{\partial \xi} + \frac{\partial N_i}{\partial y}\frac{\partial y}{\partial \xi} + \frac{\partial N_i}{\partial z}\frac{\partial z}{\partial \xi}$$

$$\frac{\partial N_i(\xi,\eta,\zeta)}{\partial \eta} = \frac{\partial N_i}{\partial x}\frac{\partial x}{\partial \eta} + \frac{\partial N_i}{\partial y}\frac{\partial y}{\partial \eta} + \frac{\partial N_i}{\partial z}\frac{\partial z}{\partial \eta}$$

$$\frac{\partial N_i(\xi,\eta,\zeta)}{\partial \zeta} = \frac{\partial N_i}{\partial x}\frac{\partial x}{\partial \zeta} + \frac{\partial N_i}{\partial y}\frac{\partial y}{\partial \zeta} + \frac{\partial N_i}{\partial z}\frac{\partial z}{\partial \zeta}$$

$\left[\frac{\partial N_i}{\partial \xi}, \frac{\partial N_i}{\partial \eta}, \frac{\partial N_i}{\partial \zeta}\right]$ は定義より簡単に求められるが

$\left[\frac{\partial N_i}{\partial x}, \frac{\partial N_i}{\partial y}, \frac{\partial N_i}{\partial z}\right]$ を実際の計算で使用する

自然座標系における偏微分（2/4）

- マトリックス表示すると：

$$\begin{Bmatrix} \frac{\partial N_i}{\partial \xi} \\ \frac{\partial N_i}{\partial \eta} \\ \frac{\partial N_i}{\partial \zeta} \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial x}{\partial \xi} & \frac{\partial y}{\partial \xi} & \frac{\partial z}{\partial \xi} \\ \frac{\partial x}{\partial \eta} & \frac{\partial y}{\partial \eta} & \frac{\partial z}{\partial \eta} \\ \frac{\partial x}{\partial \zeta} & \frac{\partial y}{\partial \zeta} & \frac{\partial z}{\partial \zeta} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \frac{\partial N_i}{\partial x} \\ \frac{\partial N_i}{\partial y} \\ \frac{\partial N_i}{\partial z} \end{Bmatrix} = [J] \begin{Bmatrix} \frac{\partial N_i}{\partial x} \\ \frac{\partial N_i}{\partial y} \\ \frac{\partial N_i}{\partial z} \end{Bmatrix}$$

$$[J] = \begin{bmatrix} J_{11} & J_{12} & J_{13} \\ J_{21} & J_{22} & J_{23} \\ J_{31} & J_{32} & J_{33} \end{bmatrix}$$

$[J]$: ヤコビのマトリクス（Jacobi matrix Jacobian）

自然座標系における偏微分（3/4）

- N_iの定義より簡単に求められる

$$J_{11}=\frac{\partial x}{\partial \xi}=\frac{\partial}{\partial \xi}\left(\sum_{i=1}^{8}N_i x_i\right)=\sum_{i=1}^{8}\frac{\partial N_i}{\partial \xi}x_i,\quad J_{12}=\frac{\partial y}{\partial \xi}=\frac{\partial}{\partial \xi}\left(\sum_{i=1}^{8}N_i y_i\right)=\sum_{i=1}^{8}\frac{\partial N_i}{\partial \xi}y_i,$$

$$J_{13}=\frac{\partial z}{\partial \xi}=\frac{\partial}{\partial \xi}\left(\sum_{i=1}^{8}N_i z_i\right)=\sum_{i=1}^{8}\frac{\partial N_i}{\partial \xi}z$$

$$J_{21}=\frac{\partial x}{\partial \eta}=\frac{\partial}{\partial \eta}\left(\sum_{i=1}^{8}N_i x_i\right)=\sum_{i=1}^{8}\frac{\partial N_i}{\partial \eta}x_i,\quad J_{22}=\frac{\partial y}{\partial \eta}=\frac{\partial}{\partial \eta}\left(\sum_{i=1}^{8}N_i y_i\right)=\sum_{i=1}^{8}\frac{\partial N_i}{\partial \eta}y_i,$$

$$J_{23}=\frac{\partial z}{\partial \eta}=\frac{\partial}{\partial \eta}\left(\sum_{i=1}^{8}N_i z_i\right)=\sum_{i=1}^{8}\frac{\partial N_i}{\partial \eta}z_i$$

$$J_{31}=\frac{\partial x}{\partial \zeta}=\frac{\partial}{\partial \zeta}\left(\sum_{i=1}^{8}N_i x_i\right)=\sum_{i=1}^{8}\frac{\partial N_i}{\partial \zeta}x_i,\quad J_{32}=\frac{\partial y}{\partial \zeta}=\frac{\partial}{\partial \zeta}\left(\sum_{i=1}^{8}N_i y_i\right)=\sum_{i=1}^{8}\frac{\partial N_i}{\partial \zeta}y_i,$$

$$J_{33}=\frac{\partial z}{\partial \zeta}=\frac{\partial}{\partial \zeta}\left(\sum_{i=1}^{8}N_i z_i\right)=\sum_{i=1}^{8}\frac{\partial N_i}{\partial \zeta}z_i$$

JACOBI （2/4）

```
!C
!C==   DETERMINANT of the JACOBIAN

      dXdQ =                                                            &
     &           + PNQ(jp,kp,1) * X1 + PNQ(jp,kp,2) * X2                &
     &           + PNQ(jp,kp,3) * X3 + PNQ(jp,kp,4) * X4                &
     &           + PNQ(jp,kp,5) * X5 + PNQ(jp,kp,6) * X6                &
     &           + PNQ(jp,kp,7) * X7 + PNQ(jp,kp,8) * X8
      dYdQ =                                                            &
     &           + PNQ(jp,kp,1) * Y1 + PNQ(jp,kp,2) * Y2                &
     &           + PNQ(jp,kp,3) * Y3 + PNQ(jp,kp,4) * Y4                &
     &           + PNQ(jp,kp,5) * Y5 + PNQ(jp,kp,6) * Y6                &
     &           + PNQ(jp,kp,7) * Y7 + PNQ(jp,kp,8) * Y8
      dZdQ =                                                            &
     &           + PNQ(jp,kp,1) * Z1 + PNQ(jp,kp,2) * Z2                &
     &           + PNQ(jp,kp,3) * Z3 + PNQ(jp,kp,4) * Z4                &
     &           + PNQ(jp,kp,5) * Z5 + PNQ(jp,kp,6) * Z6                &
     &           + PNQ(jp,kp,7) * Z7 + PNQ(jp,kp,8) * Z8
      dXdE =                                                            &
     &           + PNE(ip,kp,1) * X1 + PNE(ip,kp,2) * X2                &
     &           + PNE(ip,kp,3) * X3 + PNE(ip,kp,4) * X4                &
     &           + PNE(ip,kp,5) * X5 + PNE(ip,kp,6) * X6                &
     &           + PNE(ip,kp,7) * X7 + PNE(ip,kp,8) * X8
      dYdE =                                                            &
     &           + PNE(ip,kp,1) * Y1 + PNE(ip,kp,2) * Y2                &
     &           + PNE(ip,kp,3) * Y3 + PNE(ip,kp,4) * Y4                &
     &           + PNE(ip,kp,5) * Y5 + PNE(ip,kp,6) * Y6                &
     &           + PNE(ip,kp,7) * Y7 + PNE(ip,kp,8) * Y8
      dZdE =                                                            &
     &           + PNE(ip,kp,1) * Z1 + PNE(ip,kp,2) * Z2                &
     &           + PNE(ip,kp,3) * Z3 + PNE(ip,kp,4) * Z4                &
     &           + PNE(ip,kp,5) * Z5 + PNE(ip,kp,6) * Z6                &
     &           + PNE(ip,kp,7) * Z7 + PNE(ip,kp,8) * Z8
```

$$[J]=\begin{bmatrix} J_{11} & J_{12} & J_{13} \\ J_{21} & J_{22} & J_{23} \\ J_{31} & J_{32} & J_{33} \end{bmatrix}$$

$$\mathrm{dXdQ}=\frac{\partial x}{\partial \xi}=J_{11}$$

$$\mathrm{dYdQ}=\frac{\partial y}{\partial \xi}=J_{12}$$

$$\mathrm{dZdQ}=\frac{\partial z}{\partial \xi}=J_{13}$$

JACOBI (3/4)

```
      dXdT =                                                          &
     &           + PNT(ip,jp,1) * X1 + PNT(ip,jp,2) * X2              &
     &           + PNT(ip,jp,3) * X3 + PNT(ip,jp,4) * X4              &
     &           + PNT(ip,jp,5) * X5 + PNT(ip,jp,6) * X6              &
     &           + PNT(ip,jp,7) * X7 + PNT(ip,jp,8) * X8
      dYdT =                                                          &
     &           + PNT(ip,jp,1) * Y1 + PNT(ip,jp,2) * Y2              &
     &           + PNT(ip,jp,3) * Y3 + PNT(ip,jp,4) * Y4              &
     &           + PNT(ip,jp,5) * Y5 + PNT(ip,jp,6) * Y6              &
     &           + PNT(ip,jp,7) * Y7 + PNT(ip,jp,8) * Y8
      dZdT =                                                          &
     &           + PNT(ip,jp,1) * Z1 + PNT(ip,jp,2) * Z2              &
     &           + PNT(ip,jp,3) * Z3 + PNT(ip,jp,4) * Z4              &
     &           + PNT(ip,jp,5) * Z5 + PNT(ip,jp,6) * Z6              &
     &           + PNT(ip,jp,7) * Z7 + PNT(ip,jp,8) * Z8

      DETJ(ip,jp,kp)= dXdQ*(dYdE*dZdT-dZdE*dYdT) +                    &
     &                dYdQ*(dZdE*dXdT-dXdE*dZdT) +                    &
     &                dZdQ*(dXdE*dYdT-dYdE*dXdT)

!C
!C==   INVERSE JACOBIAN
      coef= 1.d0 / DETJ(ip,jp,kp)

      a11= coef * ( dYdE*dZdT - dZdE*dYdT )
      a12= coef * ( dZdQ*dYdT - dYdQ*dZdT )
      a13= coef * ( dYdQ*dZdE - dZdQ*dYdE )

      a21= coef * ( dZdE*dXdT - dXdE*dZdT )
      a22= coef * ( dXdQ*dZdT - dZdQ*dXdT )
      a23= coef * ( dZdQ*dXdE - dXdQ*dZdE )

      a31= coef * ( dXdE*dYdT - dYdE*dXdT )
      a32= coef * ( dYdQ*dXdT - dXdQ*dYdT )
      a33= coef * ( dXdQ*dYdE - dYdQ*dXdE )

      DETJ(ip,jp,kp)= dabs(DETJ(ip,jp,kp))
```

$$[J]=\begin{bmatrix} J_{11} & J_{12} & J_{13} \\ J_{21} & J_{22} & J_{23} \\ J_{31} & J_{32} & J_{33} \end{bmatrix}$$

自然座標系における偏微分（4/4）

- 従って下記のように偏微分を計算できる
  - ヤコビアン（3×3行列）の逆行列を求める

$$\begin{Bmatrix} \frac{\partial N_i}{\partial x} \\ \frac{\partial N_i}{\partial y} \\ \frac{\partial N_i}{\partial z} \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial x}{\partial \xi} & \frac{\partial y}{\partial \xi} & \frac{\partial z}{\partial \xi} \\ \frac{\partial x}{\partial \eta} & \frac{\partial y}{\partial \eta} & \frac{\partial z}{\partial \eta} \\ \frac{\partial x}{\partial \zeta} & \frac{\partial y}{\partial \zeta} & \frac{\partial z}{\partial \zeta} \end{bmatrix}^{-1} \begin{Bmatrix} \frac{\partial N_i}{\partial \xi} \\ \frac{\partial N_i}{\partial \eta} \\ \frac{\partial N_i}{\partial \zeta} \end{Bmatrix} = \left[J \right]^{-1} \begin{Bmatrix} \frac{\partial N_i}{\partial \xi} \\ \frac{\partial N_i}{\partial \eta} \\ \frac{\partial N_i}{\partial \zeta} \end{Bmatrix}$$

JACOBI （3/4）

```
      dXdT =                                                          &
     &           + PNT(ip,jp,1) * X1 + PNT(ip,jp,2) * X2              &
     &           + PNT(ip,jp,3) * X3 + PNT(ip,jp,4) * X4              &
     &           + PNT(ip,jp,5) * X5 + PNT(ip,jp,6) * X6              &
     &           + PNT(ip,jp,7) * X7 + PNT(ip,jp,8) * X8
      dYdT =                                                          &
     &           + PNT(ip,jp,1) * Y1 + PNT(ip,jp,2) * Y2              &
     &           + PNT(ip,jp,3) * Y3 + PNT(ip,jp,4) * Y4              &
     &           + PNT(ip,jp,5) * Y5 + PNT(ip,jp,6) * Y6              &
     &           + PNT(ip,jp,7) * Y7 + PNT(ip,jp,8) * Y8
      dZdT =                                                          &
     &           + PNT(ip,jp,1) * Z1 + PNT(ip,jp,2) * Z2              &
     &           + PNT(ip,jp,3) * Z3 + PNT(ip,jp,4) * Z4              &
     &           + PNT(ip,jp,5) * Z5 + PNT(ip,jp,6) * Z6              &
     &           + PNT(ip,jp,7) * Z7 + PNT(ip,jp,8) * Z8

      DETJ(ip,jp,kp)= dXdQ*(dYdE*dZdT-dZdE*dYdT) +                    &
     &                dYdQ*(dZdE*dXdT-dXdE*dZdT) +                    &
     &                dZdQ*(dXdE*dYdT-dYdE*dXdT)

!C
!C==   INVERSE JACOBIAN
      coef= 1.d0 / DETJ(ip,jp,kp)

      a11= coef * ( dYdE*dZdT - dZdE*dYdT )
      a12= coef * ( dZdQ*dYdT - dYdQ*dZdT )
      a13= coef * ( dYdQ*dZdE - dZdQ*dYdE )

      a21= coef * ( dZdE*dXdT - dXdE*dZdT )
      a22= coef * ( dXdQ*dZdT - dZdQ*dXdT )
      a23= coef * ( dZdQ*dXdE - dXdQ*dZdE )

      a31= coef * ( dXdE*dYdT - dYdE*dXdT )
      a32= coef * ( dYdQ*dXdT - dXdQ*dYdT )
      a33= coef * ( dXdQ*dYdE - dYdQ*dXdE )

      DETJ(ip,jp,kp)= dabs(DETJ(ip,jp,kp))
```

$$[J]^{-1} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix}$$

JACOBI（4/4）

```
!C
!C== set the dNi/dX, dNi/dY & dNi/dZ components
        PNX(ip,jp,kp,1)= a11*PNQ(jp,kp,1) + a12*PNE(ip,kp,1) + a13*PNT(ip,jp,1)
        PNX(ip,jp,kp,2)= a11*PNQ(jp,kp,2) + a12*PNE(ip,kp,2) + a13*PNT(ip,jp,2)
        PNX(ip,jp,kp,3)= a11*PNQ(jp,kp,3) + a12*PNE(ip,kp,3) + a13*PNT(ip,jp,3)
        PNX(ip,jp,kp,4)= a11*PNQ(jp,kp,4) + a12*PNE(ip,kp,4) + a13*PNT(ip,jp,4)
        PNX(ip,jp,kp,5)= a11*PNQ(jp,kp,5) + a12*PNE(ip,kp,5) + a13*PNT(ip,jp,5)
        PNX(ip,jp,kp,6)= a11*PNQ(jp,kp,6) + a12*PNE(ip,kp,6) + a13*PNT(ip,jp,6)
        PNX(ip,jp,kp,7)= a11*PNQ(jp,kp,7) + a12*PNE(ip,kp,7) + a13*PNT(ip,jp,7)
        PNX(ip,jp,kp,8)= a11*PNQ(jp,kp,8) + a12*PNE(ip,kp,8) + a13*PNT(ip,jp,8)

        PNY(ip,jp,kp,1)= a21*PNQ(jp,kp,1) + a22*PNE(ip,kp,1) + a23*PNT(ip,jp,1)
        PNY(ip,jp,kp,2)= a21*PNQ(jp,kp,2) + a22*PNE(ip,kp,2) + a23*PNT(ip,jp,2)
        PNY(ip,jp,kp,3)= a21*PNQ(jp,kp,3) + a22*PNE(ip,kp,3) + a23*PNT(ip,jp,3)
        PNY(ip,jp,kp,4)= a21*PNQ(jp,kp,4) + a22*PNE(ip,kp,4) + a23*PNT(ip,jp,4)
        PNY(ip,jp,kp,5)= a21*PNQ(jp,kp,5) + a22*PNE(ip,kp,5) + a23*PNT(ip,jp,5)
        PNY(ip,jp,kp,6)= a21*PNQ(jp,kp,6) + a22*PNE(ip,kp,6) + a23*PNT(ip,jp,6)
        PNY(ip,jp,kp,7)= a21*PNQ(jp,kp,7) + a22*PNE(ip,kp,7) + a23*PNT(ip,jp,7)
        PNY(ip,jp,kp,8)= a21*PNQ(jp,kp,8) + a22*PNE(ip,kp,8) + a23*PNT(ip,jp,8)

        PNZ(ip,jp,kp,1)= a31*PNQ(jp,kp,1) + a32*PNE(ip,kp,1) + a33*PNT(ip,jp,1)
        PNZ(ip,jp,kp,2)= a31*PNQ(jp,kp,2) + a32*PNE(ip,kp,2) + a33*PNT(ip,jp,2)
        PNZ(ip,jp,kp,3)= a31*PNQ(jp,kp,3) + a32*PNE(ip,kp,3) + a33*PNT(ip,jp,3)
        PNZ(ip,jp,kp,4)= a31*PNQ(jp,kp,4) + a32*PNE(ip,kp,4) + a33*PNT(ip,jp,4)
        PNZ(ip,jp,kp,5)= a31*PNQ(jp,kp,5) + a32*PNE(ip,kp,5) + a33*PNT(ip,jp,5)
        PNZ(ip,jp,kp,6)= a31*PNQ(jp,kp,6) + a32*PNE(ip,kp,6) + a33*PNT(ip,jp,6)
        PNZ(ip,jp,kp,7)= a31*PNQ(jp,kp,7) + a32*PNE(ip,kp,7) + a33*PNT(ip,jp,7)
        PNZ(ip,jp,kp,8)= a31*PNQ(jp,kp,8) + a32*PNE(ip,kp,8) + a33*PNT(ip,jp,8)
      enddo
      enddo
      enddo
```

$$\begin{Bmatrix} \frac{\partial N_i}{\partial x} \\ \frac{\partial N_i}{\partial y} \\ \frac{\partial N_i}{\partial z} \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial x}{\partial \xi} & \frac{\partial y}{\partial \xi} & \frac{\partial z}{\partial \xi} \\ \frac{\partial x}{\partial \eta} & \frac{\partial y}{\partial \eta} & \frac{\partial z}{\partial \eta} \\ \frac{\partial x}{\partial \zeta} & \frac{\partial y}{\partial \zeta} & \frac{\partial z}{\partial \zeta} \end{bmatrix}^{-1} \begin{Bmatrix} \frac{\partial N_i}{\partial \xi} \\ \frac{\partial N_i}{\partial \eta} \\ \frac{\partial N_i}{\partial \zeta} \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \frac{\partial N_i}{\partial \xi} \\ \frac{\partial N_i}{\partial \eta} \\ \frac{\partial N_i}{\partial \zeta} \end{Bmatrix}$$

係数行列：MAT_ASS_MAIN（5/6）

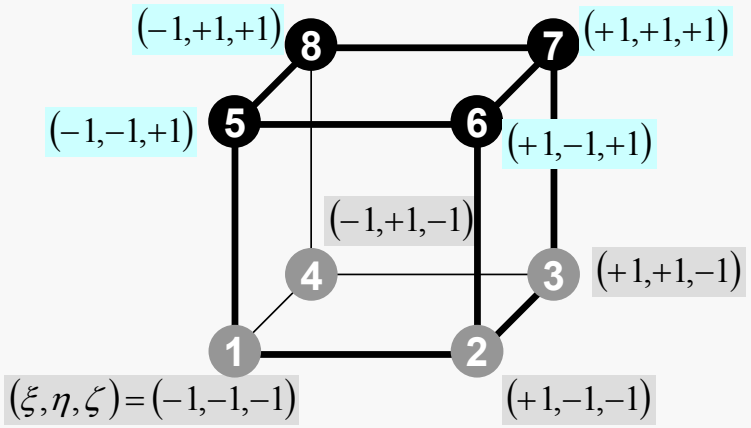
```
!C
!C== CONSTRUCT the GLOBAL MATRIX
        do ie= 1, 8
          ip = nodLOCAL(ie)
        do je= 1, 8
          jp = nodLOCAL(je)

          kk= 0
          if (jp.ne.ip) then
            iiS= index(ip-1) + 1
            iiE= index(ip  )
            do k= iiS, iiE
              if ( item(k).eq.jp ) then
                kk= k
                exit
              endif
            enddo
          endif
```

全体行列の非対角成分

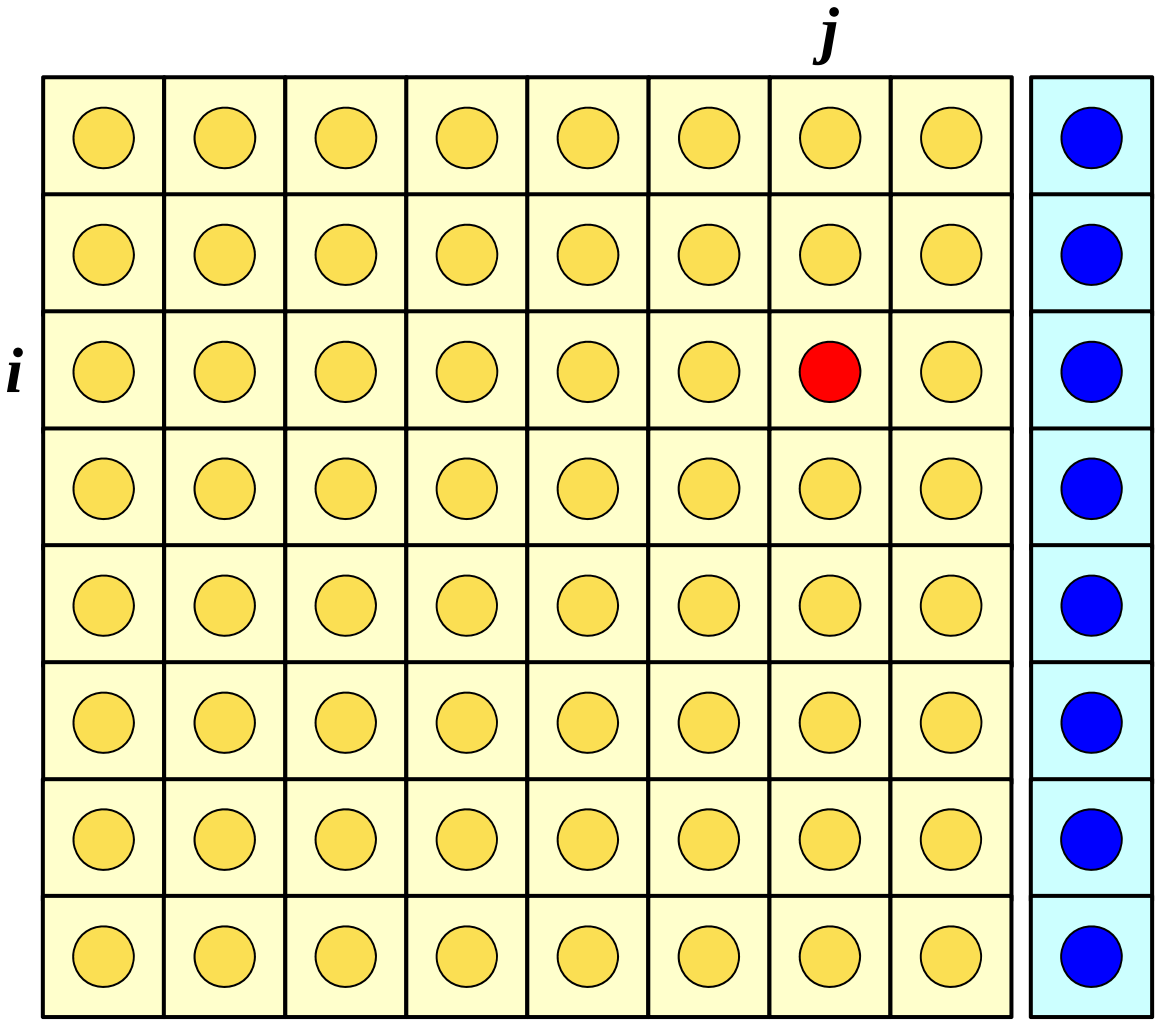
$A_{ip,jp}$

kk：itemにおけるアドレス

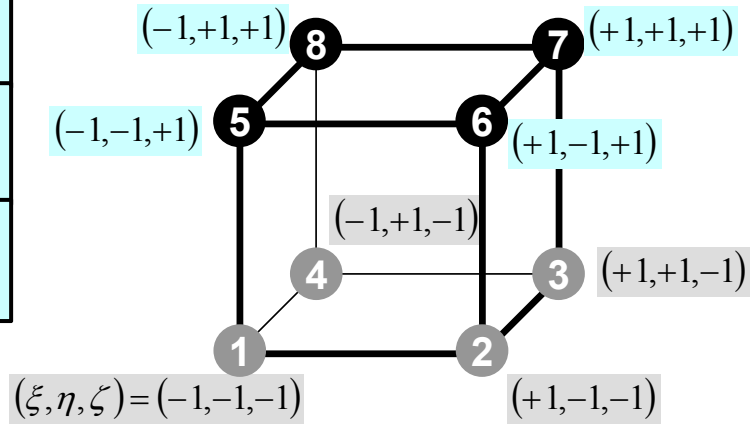
ip= nodLOCAL(ie)
jp= nodLOCAL(je)



要素マトリクス：8×8行列



$$\lfloor k_{ij} \rfloor \quad (i, j = 1 \ldots 8)$$

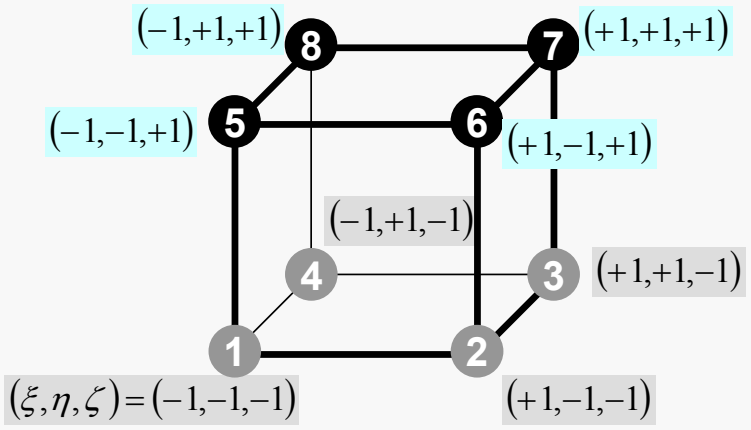


係数行列：MAT_ASS_MAIN（5/6）

```
!C
!C== CONSTRUCT the GLOBAL MATRIX
        do ie= 1, 8
          ip = nodLOCAL(ie)
        do je= 1, 8
          jp = nodLOCAL(je)

          kk= 0
          if (jp.ne.ip) then
            iiS= index(ip-1) + 1
            iiE= index(ip  )
            do k= iiS, iiE
              if ( item(k).eq.jp ) then
                kk= k
                exit
              endif
            enddo
          endif
```

要素マトリクス（i_e~j_e）
全体マトリクス（i_p~j_p）の関係

kk：itemにおけるアドレス



係数行列：MAT_ASS_MAIN（6/6）

```
        QV0   = 0.d0
        COEFij= 0.d0
        do kpn= 1, 2
        do jpn= 1, 2
        do ipn= 1, 2
          coef= dabs(DETJ(ipn,jpn,kpn))*WEI(ipn)*WEI(jpn)*WEI(kpn)

          PNXi= PNX(ipn,jpn,kpn,ie)
          PNYi= PNY(ipn,jpn,kpn,ie)
          PNZi= PNZ(ipn,jpn,kpn,ie)

          PNXj= PNX(ipn,jpn,kpn,je)
          PNYj= PNY(ipn,jpn,kpn,je)
          PNZj= PNZ(ipn,jpn,kpn,je)

          COEFij= COEFij + coef * CONDO *
     &                     (PNXi*PNXj+PNYi*PNYj+PNZi*PNZj)

          SHi= SHAPE(ipn,jpn,kpn,ie)
          QV0= QV0 + SHi * QVOL * coef
        enddo
        enddo
        enddo

        if (jp.eq.ip) then
          D(ip)= D(ip) + COEFij
          B(ip)= B(ip) + QV0*QVC
         else
          AMAT(kk)= AMAT(kk) + COEFij
        endif
      enddo
      enddo
    enddo

    return
    end
```

$$\int_{-1}^{+1}\int_{-1}^{+1}\int_{-1}^{+1}\left\{\lambda\frac{\partial N_i}{\partial x}\frac{\partial N_j}{\partial x}+\lambda\frac{\partial N_i}{\partial y}\frac{\partial N_j}{\partial y}+\lambda\frac{\partial N_i}{\partial z}\frac{\partial N_j}{\partial z}\right\}\det|J|\,d\xi d\eta d\zeta$$

係数行列：MAT_ASS_MAIN（6/6）

```
        QV0   = 0.d0
        COEFij= 0.d0
        do kpn= 1, 2
        do jpn= 1, 2
        do ipn= 1, 2
          coef= dabs(DETJ(ipn,jpn,kpn))*WEI(ipn)*WEI(jpn)*WEI(kpn)

          PNXi= PNX(ipn,jpn,kpn,ie)
          PNYi= PNY(ipn,jpn,kpn,ie)
          PNZi= PNZ(ipn,jpn,kpn,ie)

          PNXj= PNX(ipn,jpn,kpn,je)
          PNYj= PNY(ipn,jpn,kpn,je)
          PNZj= PNZ(ipn,jpn,kpn,je)

          COEFij= COEFij + coef * CONDO *
     &                    (PNXi*PNXj+PNYi*PNYj+PNZi*PNZj)

          SHi= SHAPE(ipn,jpn,kpn,ie)
          QV0= QV0 + SHi * QV0L * coef
        enddo
        enddo
        enddo

        if (jp.eq.ip) then
          D(ip)= D(ip) + COEFij
          B(ip)= B(ip) + QV0*QVC
         else
          AMAT(kk)= AMAT(kk) + COEFij
        endif
      enddo
      enddo
    enddo

    return
    end
```

$$I = \int_{-1}^{+1}\int_{-1}^{+1}\int_{-1}^{+1} f(\xi,\eta,\zeta)\, d\xi d\eta d\zeta = \sum_{i=1}^{L}\sum_{j=1}^{M}\sum_{k=1}^{N} W_i \cdot W_j \cdot W_k \cdot f(\xi_i,\eta_j,\zeta_k)$$

$$\int_{-1}^{+1}\int_{-1}^{+1}\int_{-1}^{+1} \left\{ \lambda \frac{\partial N_i}{\partial x}\frac{\partial N_j}{\partial x} + \lambda \frac{\partial N_i}{\partial y}\frac{\partial N_j}{\partial y} + \lambda \frac{\partial N_i}{\partial z}\frac{\partial N_j}{\partial z} \right\} \det|J|\, d\xi d\eta d\zeta$$

係数行列：MAT_ASS_MAIN（6/6）

```
        QV0   = 0.d0
        COEFij= 0.d0
        do kpn= 1, 2
        do jpn= 1, 2
        do ipn= 1, 2
          coef= dabs(DETJ(ipn,jpn,kpn))*WEI(ipn)*WEI(jpn)*WEI(kpn)

          PNXi= PNX(ipn,jpn,kpn,ie)
          PNYi= PNY(ipn,jpn,kpn,ie)
          PNZi= PNZ(ipn,jpn,kpn,ie)

          PNXj= PNX(ipn,jpn,kpn,je)
          PNYj= PNY(ipn,jpn,kpn,je)
          PNZj= PNZ(ipn,jpn,kpn,je)

          COEFij= COEFij + coef * CONDO *
     &                     (PNXi*PNXj+PNYi*PNYj+PNZi*PNZj)

          SHi= SHAPE(ipn,jpn,kpn,ie)
          QV0= QV0 + SHi * QV0L * coef
        enddo
        enddo
        enddo

        if (jp.eq.ip) then
          D(ip)= D(ip) + COEFij
          B(ip)= B(ip) + QV0*QVC
         else
          AMAT(kk)= AMAT(kk) + COEFij
        endif
      enddo
      enddo
    enddo

    return
    end
```

$$\mathrm{coef} = W_i \cdot W_j \cdot W_k \cdot \det\left|J\left(\xi_i, \eta_j, \zeta_k\right)\right|$$

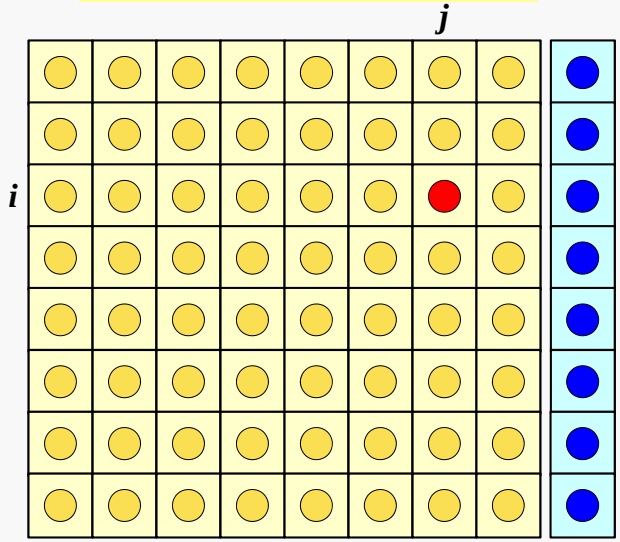
$$I = \int_{-1}^{+1}\int_{-1}^{+1}\int_{-1}^{+1} f(\xi,\eta,\zeta)\, d\xi d\eta d\zeta = \sum_{i=1}^{L}\sum_{j=1}^{M}\sum_{k=1}^{N} W_i \cdot W_j \cdot W_k \cdot f(\xi_i,\eta_j,\zeta_k)$$

$$\int_{-1}^{+1}\int_{-1}^{+1}\int_{-1}^{+1} \left\{ \lambda \frac{\partial N_i}{\partial x}\frac{\partial N_j}{\partial x} + \lambda \frac{\partial N_i}{\partial y}\frac{\partial N_j}{\partial y} + \lambda \frac{\partial N_i}{\partial z}\frac{\partial N_j}{\partial z} \right\} \det|J|\, d\xi d\eta d\zeta$$

係数行列：MAT_ASS_MAIN（6/6）

```
        QVO   = 0.d0
        COEFij= 0.d0
        do kpn= 1, 2
        do jpn= 1, 2
        do ipn= 1, 2
          coef= dabs(DETJ(ipn,jpn,kpn))*WEI(ipn)*WEI(jpn)*WEI(kpn)

          PNXi= PNX(ipn,jpn,kpn,ie)
          PNYi= PNY(ipn,jpn,kpn,ie)
          PNZi= PNZ(ipn,jpn,kpn,ie)

          PNXj= PNX(ipn,jpn,kpn,je)
          PNYj= PNY(ipn,jpn,kpn,je)
          PNZj= PNZ(ipn,jpn,kpn,je)

          COEFij= COEFij + coef * CONDO *
     &                     (PNXi*PNXj+PNYi*PNYj+PNZi*PNZj)

          SHi= SHAPE(ipn,jpn,kpn,ie)
          QVO= QVO + SHi * QVOL * coef
        enddo
        enddo
        enddo

        if (jp.eq.ip) then
          D(ip)= D(ip) + COEFij
          B(ip)= B(ip) + QVO*QVC
         else
          AMAT(kk)= AMAT(kk) + COEFij
        endif
      enddo
      enddo
    enddo

    return
    end
```

$$\left[k_{ij}\right] \quad (i,j=1\ldots8)$$



係数行列：MAT_ASS_MAIN（6/6）

```
        QV0   = 0.d0
        COEFij= 0.d0
        do kpn= 1, 2
        do jpn= 1, 2
        do ipn= 1, 2
          coef= dabs(DETJ(ipn,jpn,kpn))*WEI(ipn)*WEI(jpn)*WEI(kpn)

          PNXi= PNX(ipn,jpn,kpn,ie)
          PNYi= PNY(ipn,jpn,kpn,ie)
          PNZi= PNZ(ipn,jpn,kpn,ie)

          PNXj= PNX(ipn,jpn,kpn,je)
          PNYj= PNY(ipn,jpn,kpn,je)
          PNZj= PNZ(ipn,jpn,kpn,je)

          COEFij= COEFij + coef * CONDO *
     &                     (PNXi*PNXj+PNYi*PNYj+PNZi*PNZj)

          SHi= SHAPE(ipn,jpn,kpn,ie)
          QV0= QV0 + SHi * QVOL * coef
        enddo
        enddo
        enddo

        if (jp.eq.ip) then
          D(ip)= D(ip) + COEFij
          B(ip)= B(ip) + QV0*QVC
         else
          AMAT(kk)= AMAT(kk) + COEFij
        endif
      enddo
      enddo
    enddo

    return
    end
```

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

$$[f]^{(e)} = \int_V \dot{Q}[N]^T dV$$

$$\dot{Q}(x,y,z) = QVOL\left|x_C + y_C\right|$$

$$QVC = \left|x_C + y_C\right|$$

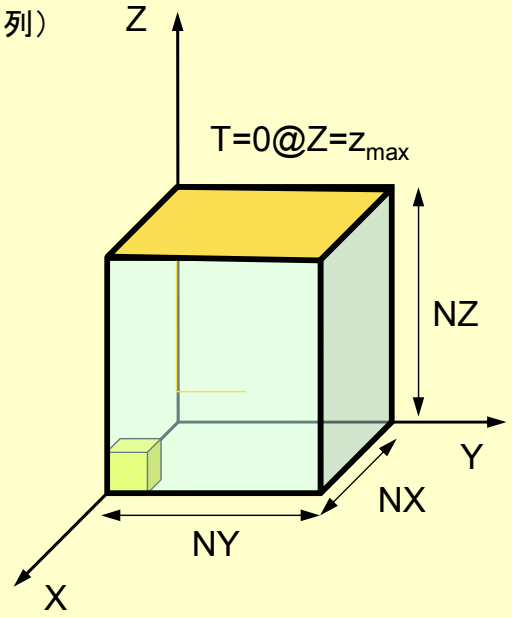
$$QV0 = \int_V QVOL[N]^T dV$$

$$[f]^{(e)} = QV0 \cdot QVC$$

MAT_ASS_BC：全体構成

```
do i= 1, N      節点ループ
   （ディリクレ）境界条件を設定する節点をマーク（IWKX）
enddo
```

```
do i= 1, N  節点ループ
  if (IWKX(i,1).eq.1) then  マークされた節点だったら
    対応する右辺ベクトル（B）の成分，対角成分（D）の成分の修正（行・列）
    do k= index(i-1)+1, index(i)
      対応する非零非対角成分（AMAT）の成分の修正（行）
    enddo
  endif
enddo

do i= 1, N  節点ループ
  do k= index (i-1)+1, index (i)
    if (IWKX(item (k),1).eq.1) then  対応する非零非対角成分の
                                     節点がマークされていたら
      対応する右辺ベクトル，非零非対角成分（AMAT）の成分の修正（列）
    endif
  enddo
enddo
```



境界条件：MAT_ASS_BC（1/2）

```
      subroutine MAT_ASS_BC
      use pfem_util
      implicit REAL*8 (A-H,O-Z)

      allocate (IWKX(N,2))
      IWKX= 0

!C
!C== Z=Zmax

      do in= 1, N
        IWKX(in,1)= 0
      enddo

      ib0= -1
      do ib0= 1, NODGRPtot
        if (NODGRP_NAME(ib0).eq.'Zmax') exit
      enddo

      do ib= NODGRP_INDEX(ib0-1)+1, NODGRP_INDEX(ib0)
        in= NODGRP_ITEM(ib)
        IWKX(in,1)= 1
      enddo
```

節点グループ名が「Zmax」である節点inにおいて：

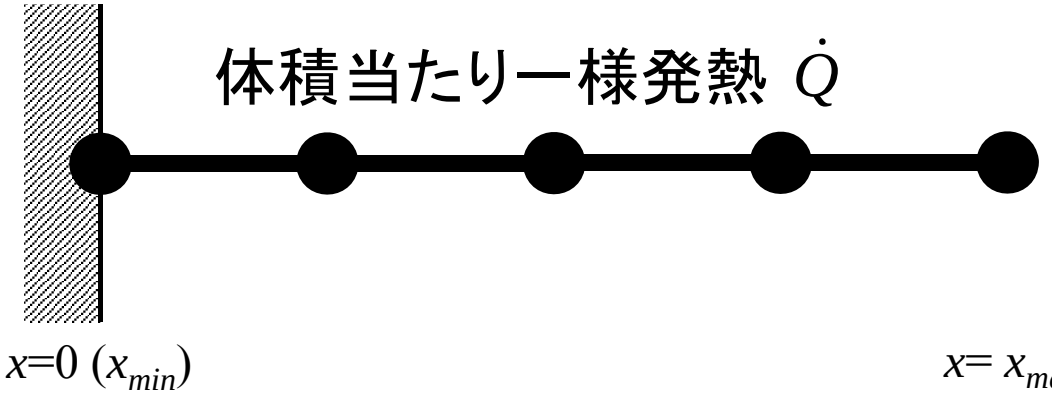
IWKX(in,1)= 1

とする

境界条件：MAT_ASS_BC（2/2）

```
      do in= 1, N
        if (IWKX(in,1).eq.1) then
          B(in)= 0.d0
          D(in)= 1.d0

          iS= index(in-1) + 1
          iE= index(in  )
          do k= iS, iE
            AMAT(k)= 0.d0
          enddo
        endif
      enddo

      do in= 1, N
        iS= index(in-1) + 1
        iE= index(in  )
        do k= iS, iE
          if (IWKX(item(k),1).eq.1) then
            AMAT(k)= 0.d0
          endif
        enddo
      enddo
!C==
      return
      end
```

対象とする問題：一次元熱伝導問題



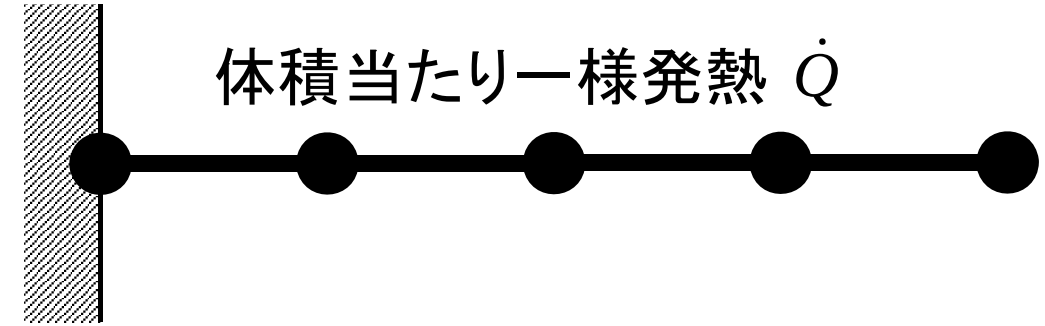
$$\frac{\partial}{\partial x}\left(\lambda\frac{\partial T}{\partial x}\right)+\dot{Q}=0$$

- 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）

復習：一次元問題

x=0で成立する方程式

T_1=0



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

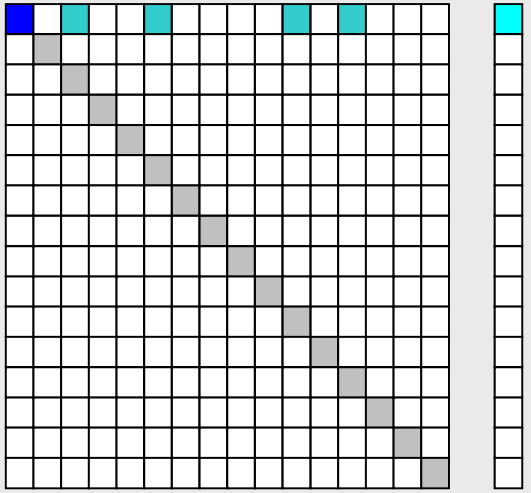
- 一様な：断面積A，熱伝導率λ
- 体積当たり一様発熱（時間当たり）〔$QL^{-3}T^{-1}$〕$\dot{Q}$
- 境界条件
  - x=0　：T=0　（固定）
  - x=x_{max} ：$\dfrac{\partial T}{\partial x}=0$（断熱）

復習：一次元問題

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



復習：一次元問題

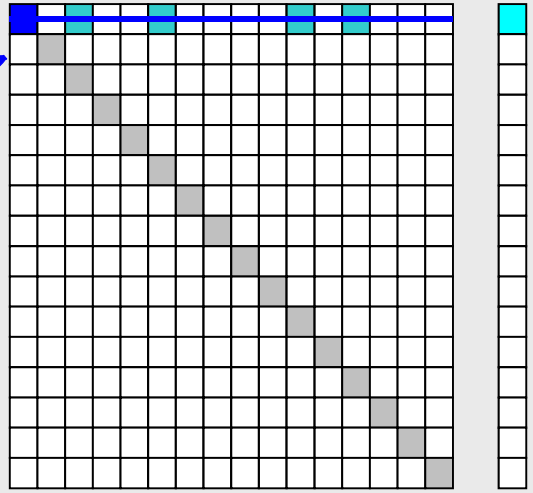
プログラム：1d.f(6/6)

第一種境界条件@x=0

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

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

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

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

T_1=0
対角成分=1，右辺=0，非対角成分=0

ゼロクリア



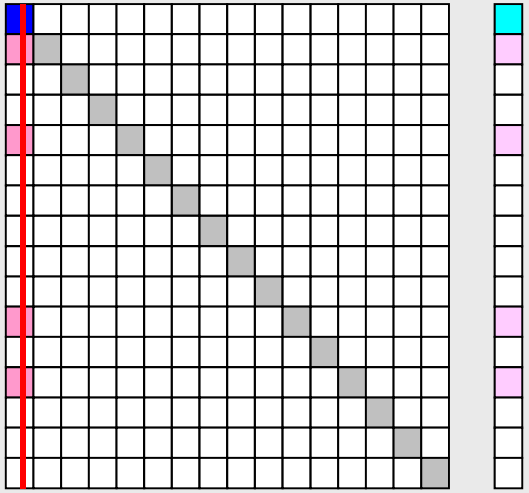
復習：一次元問題

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）

復習：一次元問題

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

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

復習：一次元問題

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

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

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

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

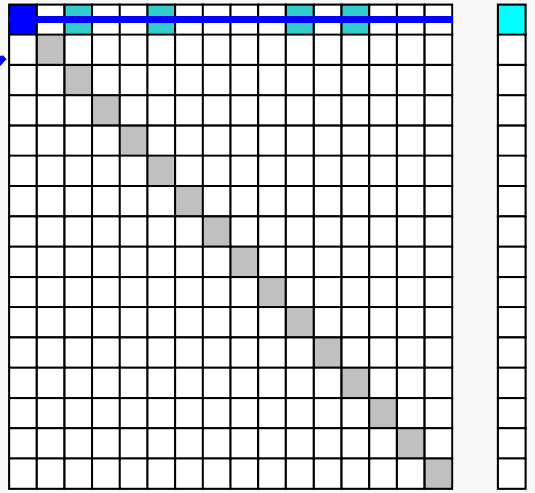
復習：一次元問題

境界条件：MAT_ASS_BC（2/2）

```
      do in= 1, N
        if (IWKX(in,1).eq.1) then
          B(in)= 0.d0
          D(in)= 1.d0

          iS= index(in-1) + 1
          iE= index(in  )
          do k= iS, iE
            AMAT(k)= 0.d0
          enddo
        endif
      enddo

      do in= 1, N
        iS= index(in-1) + 1
        iE= index(in  )
        do k= iS, iE
          if (IWKX(item(k),1).eq.1) then
            AMAT(k)= 0.d0
          endif
        enddo
      enddo
!C==
      return
      end
```

IWKX(in,1)=1となる節点に対して
対角成分=1，右辺=0，非零対角成分=0

ゼロクリア

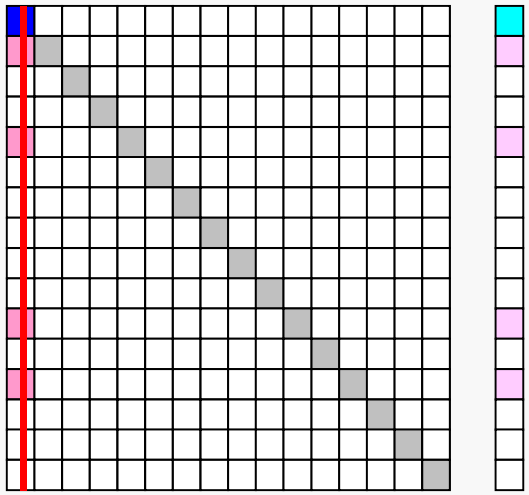


ここでやっていることも一次元の時と全く変わらない

境界条件：MAT_ASS_BC（2/2）

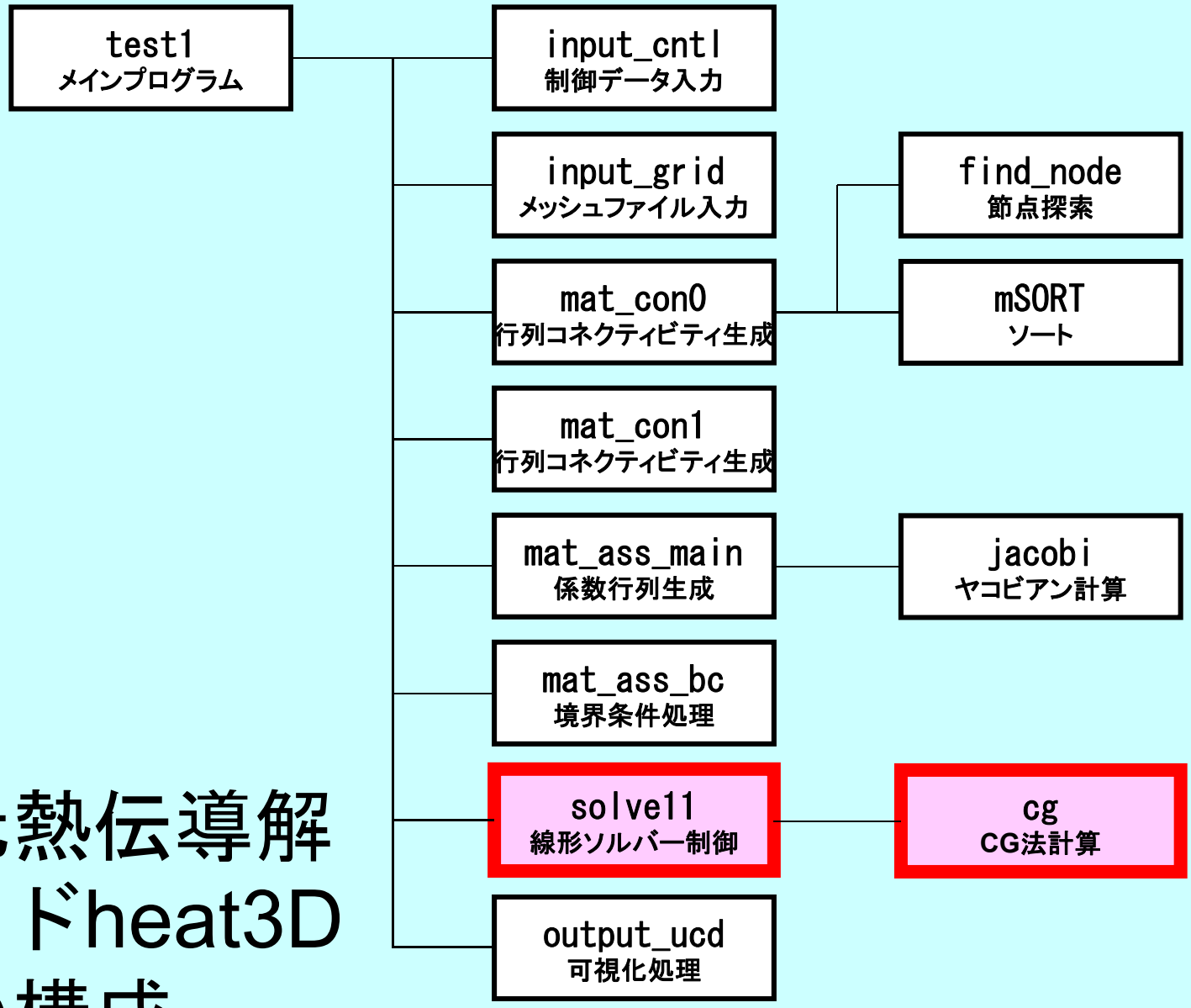
```
      do in= 1, N
        if (IWKX(in,1).eq.1) then
          B(in)= 0.d0
          D(in)= 1.d0

          iS= index(in-1) + 1
          iE= index(in  )
          do k= iS, iE
            AMAT(k)= 0.d0
          enddo
        endif
      enddo

      do in= 1, N
        iS= index(in-1) + 1
        iE= index(in  )
        do k= iS, iE
          if (IWKX(item(k),1).eq.1) then
            AMAT(k)= 0.d0
          endif
        enddo
      enddo
!C==
      return
      end
```

IWKX(in,1)=1となる節点を非零非対角成分として有している節点に対して，右辺へ移項，当該非零非対角成分=0



消去，ゼロクリア

ここでやっていることも一次元の時と全く変わらない



三次元熱伝導解析コードheat3Dの構成

全体処理

```
      program heat3D

      use solver11
      use pfem_util

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

      call INPUT_CNTL
      call INPUT_GRID

      call MAT_CON0
      call MAT_CON1

      call MAT_ASS_MAIN
      call MAT_ASS_BC

      call SOLVE11

      call OUTPUT_UCD

      end program heat3D
```

SOLVE11

```
      module SOLVER11

      contains
        subroutine SOLVE11

        use pfem_util
        use solver_CG

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

        integer :: ERROR, ICFLAG
        character(len=char_length) :: BUF

        data ICFLAG/0/

!C
!C +------------+
!C | PARAMETERs |
!C +------------+
!C===
        ITER     = pfemIarray(1)              CG法の最大反復回数
        RESID    = pfemRarray(1)              CG法の収束判定値
!C===
!C
!C +------------------+
!C | ITERATIVE solver |
!C +------------------+
!C===
        call CG                                                          &
     &     ( N, NPLU, D, AMAT, index, item, B, X, RESID, ITER, ERROR )

      ITERactual= ITER
!C===

      end subroutine SOLVE11
      end module SOLVER11
```

前処理付き共役勾配法
Preconditioned Conjugate Gradient Method（CG）

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

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

- **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)

```
      module solver_CG
      contains

      subroutine CG                                                    &
     &   (N, NPLU, D, AMAT, index, item, B, X, RESID, ITER, ERROR)

      implicit REAL*8(A-H,O-Z)
      include  'precision.inc'

      integer(kind=kint ), intent(in):: N, NPLU
      integer(kind=kint ), intent(inout):: ITER, ERROR
      real   (kind=kreal), intent(inout):: RESID
      real(kind=kreal), dimension(N)   , intent(inout):: B, X, D
      real(kind=kreal), dimension(NPLU), intent(inout):: AMAT
      integer(kind=kint ), dimension(0:N ),intent(in) :: index
      integer(kind=kint ), dimension(NPLU),intent(in) :: item

      real(kind=kreal), dimension(:,:),  allocatable       :: WW

      integer(kind=kint), parameter ::  R= 1
      integer(kind=kint), parameter ::  Z= 2
      integer(kind=kint), parameter ::  Q= 2
      integer(kind=kint), parameter ::  P= 3
      integer(kind=kint), parameter :: DD= 4

      integer(kind=kint ) :: MAXIT
      real   (kind=kreal) :: TOL, W, SS
```

CGソルバー(1/6)

```
module solver_CG
contains
subroutine solver_CG (N, NPLU, PEsmpTOT, INDEX, ITEM, ID,
integer(kind=kint ), intent(inout):: ITER, ERRO
real   (kind=kreal), intent(inout):: RESID
real(kind=kreal), dimension(N)   , intent(inout
real(kind=kreal), dimension(NPLU), intent(inout
integer(kind=kint ), dimension(0:N ),intent(in)
integer(kind=kint ), dimension(NPLU),intent(in)

real(kind=kreal), dimension(:,:),  allocatable

integer(kind=kint), parameter ::  R= 1
integer(kind=kint), parameter ::  Z= 2
integer(kind=kint), parameter ::  Q= 2
integer(kind=kint), parameter ::  P= 3
integer(kind=kint), parameter :: DD= 4

integer(kind=kint ) :: MAXIT
real   (kind=kreal) :: TOL, W, SS
```

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

Compute $r^{(0)}= b-[A]x^{(0)}$
for i= 1, 2, …
  solve $[M]z^{(i-1)}= r^{(i-1)}$
  $\rho_{i-1}= r^{(i-1)}\ z^{(i-1)}$
  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(2/6)

```
!C
!C +-------+
!C | INIT. |
!C +-------+
!C===
      ERROR= 0
      allocate (WW(N,4))
      MAXIT  = ITER
       TOL   = RESID
      X = 0.d0
!C===

!C +---------------------+
!C | {r0}= {b} - [A]{xini} |
!C +---------------------+
!C===
      do j= 1, N
        WW(j,DD)= 1.d0/D(j)
        WVAL= B(j) - D(j)*X(j)
        do k= index(j-1)+1, index(j)
          i= item(k)
          WVAL= WVAL - AMAT(k)*X(i)
        enddo
        WW(j,R)= WVAL
      enddo
```

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

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

CGソルバー(2/6)

```
!C
!C +-------+
!C | INIT. |
!C +-------+
!C===
      ERROR= 0
      allocate (WW(N,4))
      MAXIT  = ITER
       TOL   = RESID
      X = 0.d0
!C===

!C +----------------------+
!C | {r0}= {b} - [A]{xini} |
!C +----------------------+
!C===
      do j= 1, N
        WW(j,DD)= 1.d0/D(j)
        WVAL= B(j) - D(j)*X(j)
        do k= index(j-1)+1, index(j)
          i= item(k)
          WVAL= WVAL - AMAT(k)*X(i)
        enddo
        WW(j,R)= WVAL
      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(3/6)

```
      BNRM20= 0.d0
      do i= 1, N
        BNRM20= BNRM20 + B(i)**2
      enddo

      BNRM2= BNRM20

      if (BNRM2.eq.0.d0) BNRM2= 1.d0
      ITER = 0
!C===

      do iter= 1, MAXIT
!C
!C********************************************** Conjugate Gradient Iteration

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

BNRM2=|b|^2
あとで収束判定に使用

CGソルバー(3/6)

```
      BNRM20= 0.d0
      do i= 1, N
        BNRM20= BNRM20 + B(i)**2
      enddo

      BNRM2= BNRM20

      if (BNRM2.eq.0.d0) BNRM2= 1.d0
      ITER = 0
!C===

      do iter= 1, MAXIT
!C
!C*****************************************************

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

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

CGソルバー(4/6)

```
!C
!C +--------------+
!C | {RHO}= {r}{z} |
!C +--------------+
!C===
      RHO0= 0.d0
      do i= 1, N
        RHO0= RHO0 + WW(i,R)*WW(i,Z)
      enddo
      RHO= RHO0
!C===
!C +----------------------------+
!C | {p} = {z} if      ITER=1   |
!C | BETA= RHO / RHO1  otherwise |
!C +----------------------------+
!C===
      if ( ITER.eq.1 ) then
        do i= 1, N
          WW(i,P)= WW(i,Z)
        enddo
       else
         BETA= RHO / RHO1
         do i= 1, N
           WW(i,P)= WW(i,Z) + BETA*WW(i,P)
         enddo
      endif
!C===
```

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

CGソルバー(5/6)

```
!C +-------------+
!C | {q}= [A]{p} |
!C +-------------+
!C===
      do j= 1, N
        WVAL= D(j)*WW(j,P)
        do k= index(j-1)+1, index(j)
          i= item(k)
          WVAL= WVAL + AMAT(k)*WW(i,P)
        enddo
        WW(j,Q)= WVAL
      enddo
!C===
!C +--------------------+
!C | ALPHA= RHO / {p}{q} |
!C +--------------------+
!C===
      C10= 0.d0
      do i= 1, N
        C10= C10 + WW(i,P)*WW(i,Q)
      enddo
      C1= C10
      ALPHA= RHO / C1
!C===
```

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

CGソルバー(6/6)

```
!C
!C +--------------------+
!C | {x}= {x} + ALPHA*{p} |
!C | {r}= {r} - ALPHA*{q} |
!C +--------------------+
!C===
      do i= 1, N
         X(i)  = X (i)   + ALPHA * WW(i,P)
        WW(i,R)= WW(i,R) - ALPHA * WW(i,Q)
      enddo
!C===
      DNRM20= 0.d0
      do i= 1, N
        DNRM20= DNRM20 + WW(i,R)**2
      enddo
      DNRM2= DNRM20
      RESID= dsqrt(DNRM2/BNRM2)

      if ( RESID.le.TOL    ) exit
      if ( ITER .eq.MAXIT ) ERROR= -300

      RHO1 = RHO
    enddo
!C===
```

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

CGソルバー(6/6)

```
!C
!C +---------------------+
!C | {x}= {x} + ALPHA*{p} |
!C | {r}= {r} - ALPHA*{q} |
!C +---------------------+
!C===
        do i= 1, N
           X(i)  = X (i)   + ALPHA * WW(i,P)
          WW(i,R)= WW(i,R) - ALPHA * WW(i,Q)
        enddo
!C===
        DNRM20= 0.d0
        do i= 1, N
          DNRM20= DNRM20 + WW(i,R)**2
        enddo
        DNRM2= DNRM20
        RESID= dsqrt(DNRM2/BNRM2)

        if ( RESID.le.TOL    ) exit
        if ( ITER .eq.MAXIT ) ERROR= -300

        RHO1 = RHO
      enddo
!C===
```

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

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