

# 1 FEM-MD プログラム仕様

## 1.1 module

- fem\_arrays FEM に必要な共通変数
- work\_arrays MD に必要な共通変数
- connect FEM-MD に必要な共通変数

## 1.2 メインプログラム

1. FEM データの読み込み (data.f)
2. FEM-MD 結合データの読み込み (data\_ncor.f)  
変位を受け渡す節点/原子の対応表の読み込み (ncor2.dat,ncor3.dat)。変位境界条件の再設定 (NTDIS,IDIS)
3. MD プログラムの初期設定 (md\_init.f)  
MD に必要なファイルの読み込み (posi.dat,number.dat,lattice.dat) と、book-keeping、module connect(付録資料) の変数のアロケートを行う。
4. MD → FEM への変位の受け渡し (data\_md.f)  
ncor2.dat の情報により、領域 2 の MD → FEM 変位受け渡しを行う。
5. 剛性マトリックスの作成 (gauss.f~bound.f)
6. 共役勾配法用配列 (SYK(\*)) 作成 (solve\_c.f)、その他 index 作成  
通常の FEM ルーチンだが、バンド行列のプログラムを共役勾配法に転用しているため、バンド行列 (GK) と、共役勾配法用一次元配列 (SYK) の両方を計算する。
7. 共役勾配法計算サブルーチン (solve\_cg.f(femcg3.f))
8. FEM-MD 共役勾配法サブルーチン (pcg.f)  
初期の残差ベクトル  $r_0$ 、初期の探索ベクトル  $p_0$  設定。  
初期の変位ベクトル  $x_1 = x_0 + \alpha_0 p_0 (U = x_1 \times DIAG)$   
分子動力学共役勾配法計算 md\_iccg.f (femcg3.f 内の pcg.f 内に MD プログラムを埋め込む)  
(a) FEM のひずみ・応力・節点ひずみの算出  
(b) FEM → MD の変位 (call data\_fem(u,epn,mn))  
(c) MD 計算 (call molcal) 分子動力学と共役勾配法を選ぶ  
(d) MD → FEM の変位 (call data\_md(idis,ub))  
(e) 力ベクトルの作り直し (call bound\_r(iform,fb,f,idis,ub,gk))  
残差ベクトル  $r_1 = r_0 - \alpha_1 A p_0 + b'$  ( $b' = b_1 - b_0$ )  
探索ベクトル  $p_1 = q - \beta_0 p_0$   
変位ベクトル  $x_2 = x_1 + \alpha_1 p_1$   
※ pcg.f 内で、md\_iccg.f も含め繰り返す (ループ 400)。  
収束の判定は残差の二乗和が初期値の EPS になった場合。また、最大繰り返す数 MTIR に到達した場合もループは終了する<sup>1</sup>。
9. FEM の出力 (output.f)
10. MD の出力 (output\_md.f)  
原子変位・応力・ひずみなどの出力

---

<sup>1</sup>EPS,MTIR は input.dat より入力

```

module connect
implicit integer (i-n)
implicit double precision (a-h,o-z)
allocatable :: ux(:),uy(:),uz(:) ! atomic displacement
allocatable :: x0(:),y0(:),z0(:) ! atomic initial position
allocatable :: atomep(:, :) ! atomic level strain
cccc region II,III information
allocatable :: pcor(:, :)
allocatable :: ncor2(:, :),ncor(:, :)
common /dco/ d_con ! for internal displacement
common /nr0/ nr2,nr3,ntdis0

```

表 1: connect.mod

## 2 データの引渡し

- DATA\_MD(IDIS,UB)

MD から FEM 節点へデータを受け渡す。ncor2.dat を読み込む。

ncor2.dat は左から、対応原子、内部変位の方向、領域 (必ず 2)、対応節点番号、0 という並びである。個数は nr2 で、ncor2(\*,5) とともに、connect.inc で共有している。

原子	内部変位	領域	節点番号	0
155	-1	2	521	0
155	-1	2	522	0
158	-1	2	571	0
158	-1	2	572	0
160	-1	2	615	0
160	-1	2	616	0
162	-1	2	659	0
162	-1	2	660	0
164	-1	2	703	0

表 2: ncor2.dat

- DATA\_FEM(U,EPN,NN)

FEM から MD へデータを受け渡す。ncor3.dat を読み込む。

ncor3.dat は左から、拘束する原子番号、内部変位の方向、対応節点、対応要素 (対応節点が 0 のとき)、要素内位置 (規格化座標) である。個数は nr3 で、ncor3(\*,8) とともに、connect.inc で共有している。

節点と対応する原子は節点の変位により、節点と対応しない原子は要素内の内挿関数から求まる変位により拘束される。

原子番号	内部変位	領域	節点番号	要素番号	要素内位置		
266	-1	3	417	0	0.000000E+00	0.000000E+00	0.000000E+00
267	1	3	0	201	-0.500000E+00	-0.500000E+00	-0.500000E+00
268	-1	3	0	201	0.000000E+00	0.000000E+00	-0.100000E+01
269	1	3	0	201	0.500000E+00	0.500000E+00	-0.500000E+00
270	-1	3	0	200	0.000000E+00	0.100000E+01	0.000000E+00
271	1	3	0	201	0.500000E+00	-0.500000E+00	0.500000E+00
272	-1	3	0	177	0.100000E+01	0.000000E+00	0.000000E+00
273	1	3	0	201	-0.500000E+00	0.500000E+00	0.500000E+00
274	-1	3	467	0	0.000000E+00	0.000000E+00	0.000000E+00
275	1	3	0	225	-0.500000E+00	-0.500000E+00	-0.500000E+00
276	-1	3	0	225	0.000000E+00	0.000000E+00	-0.100000E+01
277	1	3	0	225	0.500000E+00	0.500000E+00	-0.500000E+00

表 3: ncor3.dat