



Title	直接解法による3次元ポアソン方程式計算プログラムの利用の手引
Author(s)	酒井, 勝弘
Citation	大阪大学大型計算機センターニュース. 1988, 69, p. 71-85
Version Type	VoR
URL	<a href="https://hdl.handle.net/11094/65779">https://hdl.handle.net/11094/65779</a>
rights	
Note	

*The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA*

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

The University of Osaka

# 直接解法による3次元ポアソン方程式 計算プログラムの利用の手引

\* 大阪大学工学部 酒 井 勝 弘

## § 1 は じ め に

科学技術計算に於いて種々の境界条件を有するポアソン方程式を解く問題は極めて多い。熱伝導、原子炉内中性子拡散問題の他、放物型のナビア・ストークス方程式の場合でもその発散をとって圧力に関するポアソン方程式に変換して解く場合がある<sup>1)</sup>。更に近年計算機の発達により計算機による機器構造物等の物理的乃至化学的特性に関する数値予測のニーズが高まっており、大型体系での高速・高精度の計算が要求されている。特に、近年スーパーコンピュータの出現に伴い台頭しつつある乱流場の直接数値シミュレーションを行う場合、多大なタイムステップに亘ってポアソン方程式を解く必要があり、その高速化、高精度化は切実・急務である。このような背景を鑑みて、いくつかの境界条件を持つ3次元ポアソン方程式を直接解法で高速・高精度（差分近似の範囲内において）に解くサブルーチンSPOISN（単精度計算用）、DPOISN（倍精度計算用）を開発した。

## § 2 ポアソン方程式の解法<sup>1)</sup>

ポアソン方程式(1)の解Pを inhomogenous boundary condition (以下IHBCと略す)を持つ解P°と homogenous boundary condition (以下HBCと略す)を持つ解P\* に分離して重畳法によって解く。

即ち

$$\nabla^2 P = S, \quad (1a)$$

$$P = P^\circ + P^*. \quad (1b)$$

分離された解P°とP\* には一般に任意性が伴うが以下の解法で解るようにPを決める暁に於いては、全ての境界条件がNeumann 型又は周期条件で与えられる場合を除いて唯一に決る。境界条件が全てNeumann 型で与えられる場合は、Gauss の発散定理より得られる保存の条件

$$\text{即ち } \int_A \nabla P|_B \cdot \vec{n} dA = \int_V S dv \text{ が満足されてなければならないと同時にもう一つ例えば体系}$$

全体のPの平均値が与えられないとPの唯一解は決らない。境界条件が全て周期条件で与えられる場合も、Pの平均値等のもう一つの条件が必要である。

I H B Cを持つ1つの差分解P°は、差分スキームを決めれば容易に決める事ができる。例え

\* 現在西独カールスルーエ原子核研究所

ば計算体系の内点で全てゼロ、境界点では与えられた境界条件を満足するように決めてやればよい（内点の値をどうとるか任意性がある。本プログラムではゼロとしている）。

次に、この  $P^0$  を用いて  $P^*$  に対する modified Poisson equation (2) が得られる。

$$\nabla^2 P^* = S^* \quad (2a)$$

$$S^* \equiv S - \nabla^2 P^0 \quad (2b)$$

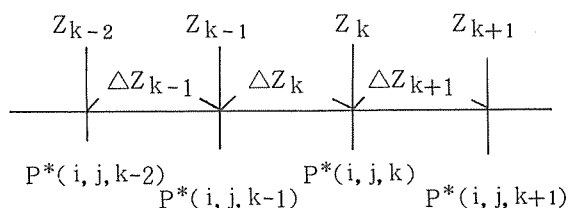
これをフーリエ級数法と tri-diagonal matrix 法を併用して解く。

まず、ラプラス演算子  $\nabla^2$  を 2 次精度の中心差分スキームによって次のように離散化する。

（ここでは、x、y 方向には等間隔メッシュ、z 方向には不等間隔メッシュとする）

$$\begin{aligned} \nabla^2 P^* = & \frac{P^*(i+1, j, k) - 2P^*(i, j, k) + P^*(i-1, j, k)}{\Delta x^2} \\ & + \frac{P^*(i, j+1, k) - 2P^*(i, j, k) + P^*(i, j-1, k)}{\Delta y^2} + \frac{2P^*(i, j, k+1)}{\Delta Z_{k+1}(\Delta Z_k + \Delta Z_{k+1})} \\ & - \frac{2P^*(i, j, k)}{\Delta Z_k \Delta Z_{k+1}} + \frac{2P^*(i, j, k-1)}{\Delta Z_k(\Delta Z_k + \Delta Z_{k+1})} \end{aligned} \quad (3)$$

$\Delta Z_k$  はメッシュ点  $k$  と  $k-1$  の間のメッシュ巾である（第 1 図参照）。



第 1 図 Z 方向メッシュ配置図

x 方向、y 方向には与えられた境界条件に対応した homogeneous boundary condition を有する離散型フーリエ級数を用いて展開する。例えば、x 方向に周期条件、y 方向には両端で Dirichlet 型の場合次の様に展開する。

$$P^*(i, j, k) = \sum_{\mu=1}^{N_1} \sum_{\nu=1}^{N_2} \tilde{P}^*(\mu, \nu, k) e^{2\pi\sqrt{-1} \frac{(\mu-1)(i-1)}{N_1}} \cdot \sin\left(\frac{\pi\nu j}{N_2+1}\right) \quad \left( \begin{matrix} 1 \leq i \leq N_1 \\ 1 \leq j \leq N_2 \end{matrix} \right) \dots\dots(4)$$

$N_1, N_2$  は各々 x 方向、y 方向のメッシュ分割総数である。

ここで  $i = 0$ 、 $i = N_1 + 1$ 、 $j = 0$ 、 $j = N_2 + 1$ 、 $k = 0$ 、 $k = N_3 + 1$  ( $N_3$  は  $z$  方向のメッシュ分割数) が各々  $x$ 、 $y$ 、 $z$  方向の境界メッシュ点である (第2図参照、但し、 $J = j + 1$ )。即ち、 $P^*(1, j, k) = P^*(N_1 + 1, j, k)$ 、 $P^*(i, N_2 + 1, k) = 0$

(4)式を(3)式に代入すると、 $z$  方向 (インデックス  $k$ ) に関し次の差分方程式を得る。

$$\frac{2P^*(\mu, \nu, k+1)}{\Delta Z_{k+1}(\Delta Z_k + \Delta Z_{k+1})} - \frac{2P^*(\mu, \nu, k)}{\Delta Z_k \Delta Z_{k+1}} + \frac{2P^*(i, j, k+1)}{\Delta Z_k(\Delta Z_k + \Delta Z_{k+1})} \quad (5a)$$

$$-(\lambda\mu^2 + \lambda\nu^2) \tilde{P}^*(\mu, \nu, k) = \tilde{S}^*(\mu, \nu, k), \quad \left( \frac{1}{1} \leq \mu \leq N_1, \frac{1}{1} \leq \nu \leq N_2 \right)$$

$$\lambda\mu^2 = \frac{4}{\Delta x^2} \sin \left[ \frac{\pi(\mu-1)}{N_1} \right], \quad \lambda\nu^2 = \frac{4}{\Delta y^2} \sin \left[ \frac{\pi\nu}{2(N_2+1)} \right] \quad (5b)$$

$\tilde{S}^*(\mu, \nu, k)$  は、 $P^*$  と同じフーリエ級数を用いた展開係数である。(5)式は3重対角行列形であるので、TDM (tri-diagonal matrix) algorithm によって逐次的に解く事ができる。即ち、

$$\tilde{P}^*(\mu, \nu, k) = U_{\mu\nu k} \tilde{P}^*(\mu, \nu, k+1) + V_{\mu\nu k} \quad (k = 1, 2, \dots, N_3) \quad (6)$$

ここで、

$$U_{\mu\nu k} = \frac{A_k}{C_k U_{\mu\nu k-1} + B_k}, \quad V_{\mu\nu k} = \frac{U_{\mu\nu k}}{A_k} (C_k V_{\mu\nu k-1} - \tilde{S}^*_{\mu\nu k}) \quad (7)$$

$$A_k = \frac{2}{\Delta Z_{k+1}(\Delta Z_k + \Delta Z_{k+1})}, \quad B_k = -(\lambda\mu^2 + \lambda\nu^2 + \frac{2}{\Delta Z_k \Delta Z_{k+1}}) \quad (8)$$

$$C_k = \frac{2}{\Delta Z_k(\Delta Z_k + \Delta Z_{k+1})}$$

$z$  方向の境界条件より境界点での  $U_{\mu\nu k}$ 、 $V_{\mu\nu k}$  が決る。例えば、両端で Neuman 型条件の場合、

$$\tilde{P}^*(\mu, \nu, 0) = P^*(\mu, \nu, 1), \quad (9a)$$

$$\tilde{P}^*(\mu, \nu, N_3) = P^*(\mu, \nu, N_3 + 1) \quad (9b)$$

$$\text{より } U_{\mu\nu 0} = 1, \quad V_{\mu\nu 0} = 0 \quad (10)$$

$$\text{及び } \tilde{P}^*(\mu, \nu, N_3 + 1) = V_{\mu\nu N_3} / (1 - U_{\mu\nu N_3}) \quad (11)$$

(4)式のフーリエ変換はFFT法によるNEC開発ASLライブラリー<sup>2)</sup>に基づいている。

### § 3 チェック計算

本ルーチンを検証する為に、解析解を有するいくつかの例題についてチェック計算を行う。

但し、解析解と計算値との比較をする場合、解析解はポアソン偏微分方程式の解であるが、一方計算値は離散化されたポアソン差分方程式の解であり、両者の間には、計算機の丸め誤差の外に離散化誤差が含まれている点に注意を要する。即ち差分スキームの精度が、問題の現象の次数に対してより高いか又は離散化誤差が充分丸め誤差以下に小さくなるようにメッシュ巾を小さくにとって比較すれば、両者の違いは丸め誤差だけ(単精度で6桁、倍精度で12桁程度)に帰することができる。

#### 例 題 1

1) ソース項  $S = 0$

2) 境界条件

X方向一周期条件

Y方向一負側境界で12.0、正側境界で1.0 即ち第2図に於いて、 $P(J=0) = 12.0$ 、

$$P(J=12) = 1.0$$

Z方向一両端で  $\partial P / \partial Z = 0$

3) 計算体系:  $NDZVX=4$ ,  $NDZVY=10$ ,  $NDZVZ=5$

メッシュ網:  $XT=4.0$ ,  $YT=10.0$ ,  $ZT=5.0$ ,

$$\Delta X=1.0, \Delta Y=1.0, \Delta Z=1.0$$

4) 解析解:  $P(y) = 12 - y$ ,  $y = (J-1)\Delta Y = J-1$

$S=0$  で  $x, z$  方向の境界条件が両側で対称であるので、  
Y方向一次元問題となる。この問題は平行壁間2次元  
ポアズイユフローの圧力場を解くのと同一問題である。

5) JCL及び入力データ

本例題をPOISNDルーチンを利用して実行する場合の

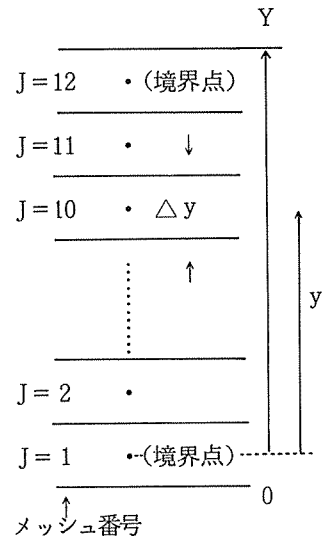
JCL及び入力データ第1表に示す。

6) 出力データ

倍精度計算による出力データを第2表に示す。

上表は比較の為、解析解も示しているが解析解とここに打出している6桁まで正確に一致している。これはこの例題が1次の現象であり、一方差分スキームの精度は2次である。従ってこの場合、離散化誤差はゼロであり、又倍精度計算であるので丸め誤差も11~12桁程度に小さいことに起因している。

7) CPUタイム CPUタイムは約0.01秒である。



第2図 Y方向メッシュ図

## 例 題 2

y 方向の負側境界条件が  $\partial p / \partial z = -1$ ，他の計算条件は、Case 1 と同じ。この場合解析解は Case 1 と同一になる。この場合の出力データを第 3 表に示す。

本ケースでも解析解との一致は良好である。

CPU タイムは例題 1 と同様約 0.01 秒である。

## 例 題 3

ソース項  $S = 1.0$  とし、他の計算条件は Case 1 と同じ。

$$\text{解析解: } P(y) = \frac{1}{2}y^2 - \frac{15}{2}y + 12$$

出力データを第 4 表に示す。

解析解との一致は良好である。即ち、以上の例題で分る通り、本プログラムが空間に関し 2 次精度であることに対応して、2 次以下の現象に関しては本プログラムは正解を与える。

CPU タイムは約 0.01 秒である。

表 1 表 JCL 及び入力データ

```
$:JOB::A, A,, R,, JPA4
$:EXEC:DPOIS
[ $:EXEC:SPOIS...単精度用]
$:LIMITS:30S,,,80000
&INPT
  NDIVX=4, NDIVY=10, NDIVZ=5,
  IOPTBC=1,
  IOPTDZ=0,
  XT=4., YT=10., ZT=5.,
  ISKIP=2, JSKIP=1, KSKIP=2,
  DZ=7*1.,
  PIN=42*12.0, POUT=42*1.0,
  DPDZ1=72*0.0, DPDZ2=72*0.0,
  S=504*0.0,
&END
$:ENDJOB
```

第 2 表 例 題 1

I	K	J	P	P (解析解)
2	2	1	1.20000E+01	12
2	2	2	1.10000E+01	11
2	2	3	1.00000E+01	10
2	2	4	9.00000E+00	9
2	2	5	8.00000E+00	8
2	2	6	7.00000E+00	7
2	2	7	6.00000E+00	6
2	2	8	5.00000E+00	5
2	2	9	4.00000E+00	4
2	2	10	3.00000E+00	3
2	2	11	2.00000E+00	2
2	2	12	1.00000E+00	1

第3表 例題 2

I	K	J	P	P (解析解)
2	2	1	1.20000E+01	12
2	2	2	1.10000E+01	11
2	2	3	1.00000E+01	10
2	2	4	9.00000E+00	9
2	2	5	8.00000E+00	8
2	2	6	7.00000E+00	7
2	2	7	6.00000E+00	6
2	2	8	5.00000E+00	5
2	2	9	4.00000E+00	4
2	2	10	3.00000E+00	3
2	2	11	2.00000E+00	2
2	2	12	1.00000E+00	1

第4表 例題 3

I	K	J	P	P (解析解)
2	2	1	1.20000E+01	12
2	2	2	6.00000E+00	6
2	2	3	1.00000E+00	1
2	2	4	-3.00000E+00	-3
2	2	5	-6.00000E+00	-6
2	2	6	-8.00000E+00	-8
2	2	7	-9.00000E+00	-9
2	2	8	-9.00000E+00	-9
2	2	9	-8.00000E+00	-8
2	2	10	-6.00000E+00	-6
2	2	11	-3.00000E+00	-3
2	2	12	1.00000E+00	1

## § 5 参 考 文 献

- 1) K. Sakai and T. Sekiya, "Numerical Simulations of Turbulent Fluid Flows. I—Fast Fourier Transform Method—, Tech. Repts. OSAKA Univ., 34 (1762) Oct. (1984) 193—200.
- 2) NEC, "SX ソフトウェア 科学技術計算ライブラリ説明書 <ASL/SX 第2分冊>

## § 6 あとがき

高速フーリエ変換法とTDMアルゴリズムの併用による直接解法で3次元ポアソン方程式を解く計算プログラムSPOIS, DPOISについて説明した。本プログラムは高速演算を主目的としている為、計算体系のとり方に制約が伴うが、使用目的によっては有効なツールになると思われる。例えばスーパーコンピュータの進歩に伴い近年台頭しつつある乱流問題、その他の直接数値シミュレーションに対しては、特に有力なツールとなろう。

```

10      PROGRAM POISSN
20      PARAMETER IM=6, JM=12, KM=7
30      DIMENSION PA(0:IM,0:JM,0:KM), SA(0:IM,0:JM,0:KM), SSA(0:IM,0:JM)
40      DIMENSION PB(0:IM,0:JM,0:KM), SB(0:IM,0:JM,0:KM), AF(0:IM), BF(1M)
50      DIMENSION PN(0:IM,0:JM,0:KM), S(1M, JM, KM)
60      DIMENSION DZ(0:KM), AK(KM), BK(0:IM, JM, KM), CK(KM), RAMX(0:IM)
70      DIMENSION RAMY(0:JM), VKB(0:IM, JM, KM), AX(1M)
80      DIMENSION UK(0:IM, JM, KM), VK(0:IM, JM, KM)
90      DIMENSION W11(3*IM), W1S1(4*JM)
100     DIMENSION XQ(JM), W1(3*JM), SSAQ(0:IM, JM)
110     DIMENSION DPDZ1(1M, JM), DPDZ2(1M, JM)
120     DIMENSION PIN(1M, KM), POUT(1M, KM)
130     NAMELIST /INPT/NDIVX,NDIVY,NDIVZ,XT,YT,ZT,IOPTBC,IOPTDZ,
140     & DZ,PIN,POUT,DPDZ1,DPDZ2,S,ISKIP,JSKIP,KSKIP
150     READ(5,INPT)
160     IMAX=IM; JMAX=JM; KMAX=KM
170     IM1=IMAX-1; JM1=JMAX-1; KM1=KMAX-1
180     CALL DPOIS (IMAX,JMAX,KMAX,XT,YT,ZT,IOPTDZ,
190     & DZ,IOPTBC,PIN,POUT,DPDZ1,DPDZ2,S,PN,
200     & AX,SSAQ,W1,XQ,W1S1,W11,VKB,VK,UK,
210     & RAMX,RAMY,AK,BK,CK,AF,BF,SA,SB,PA,PB,SSA)
220     WRITE(6,8010)
230     DO 8100 I=2,IM1,ISKIP
240     1 DO 8100 K=2,KM1,KSKIP
250     2 KK=K+KSKIP
260     2 WRITE(6,8012)
270     DO 8100 J=1,JMAX,JSKIP
280     3 S WRITE(6,8040) I,K,J,PN(I,J,K)
290     3 S 8100 CONTINUE
300     8010 FORMAT(//2X,' I ',' K ',' J ',8X,' P ')
310     8012 FORMAT(1H )
320     8040 FORMAT(2X,I3,I3,I3,2X,1PE12.5)
330     STOP
340     END
350
360     C SUBPROGRAM OF POISSON SOLVER
370     SUBROUTINE DPOIS (IM, JM, KM, XT, YT, ZT, IOPTDZ,
380     & DZ, IOPTBC, PIN, POUT, DPDZ1, DPDZ2, S, PN,
390     & AX, SSAQ, W1, XQ, W1S1, W11, VKB, VK, UK,
400     & RAMX, RAMY, AK, BK, CK, AF, BF, SA, SB, PA, PB, SSA)
410     C ***** POISSON-3D FOR ACOS-1000 *****
420     DIMENSION PA(0:IM,0:JM,0:KM), SA(0:IM,0:JM,0:KM), SSA(0:IM,0:JM)
430     DIMENSION PB(0:IM,0:JM,0:KM), SB(0:IM,0:JM,0:KM), AF(0:IM), BF(1M)
440     DIMENSION PN(0:IM,0:JM,0:KM), S(1M, JM, KM)
450     DIMENSION DZ(0:KM), AK(KM), BK(0:IM, JM, KM), CK(KM), RAMX(0:IM)
460     DIMENSION RAMY(0:JM), VKB(0:IM, JM, KM), AX(1M)
470     DIMENSION UK(0:IM, JM, KM), VK(0:IM, JM, KM)
480     DIMENSION IW(15), IW1(15), W11(3*IM)
490     DIMENSION W1S1(15), W1S1(4*JM)
500     DIMENSION XQ(JM), W1(3*JM), SSAQ(0:IM, JM)
510     DIMENSION DPDZ1(1M, JM), DPDZ2(1M, JM)
520     DIMENSION PIN(1M, KM), POUT(1M, KM)
530     C
540     C CORRESPONDENCE BETWEEN (MU,NU,K) AND (MI,NJ,K)
550     C (MU=0,MI=1) (MU=N1-1,MI=M)
560     C (NU=0,NJ=1) (NU=N2-1,NJ=N)
570     C (K=1,K=2) (K=N3,K=KM1)
580     C
590     PA1=4.0*ATAN(1.0)
600     PA12=PA1*PA1
610     NDIVX=IM-2; NDIVY=JM-2; NDIVZ=KM-2
620     M=NDIVX
630     N=NDIVY
640     IMAX=M+2

```



```

640      JMAX=N+2
650      C      JMAX=N+1  IN CASE OF MESH EDGE SCHEME
660      KMAX=NDIVZ+2
670      MH=M/2
680      IMH=IM/2
690      JMH=JM/2
700      HWIDTH=ZT/2
710      DELX=XT/NDIVX
720      DELY=YT/NDIVY
730      DELZ=ZT/NDIVZ
740      XTH=XT/2
750      YTH=YT/2
760      DELI=DELX
770      DELJ=DELY
780      DELK=DELZ
790      IM1=IMAX-1
800      JM1=JMAX-1
810      KM1=KMAX-1
820      IM2=IMAX-2
830      JM2=JMAX-2
840      KM2=KMAX-2
850      IM3=IMAX-3
860      JM3=JMAX-3
870      KM3=KMAX-3
880      RDELI = 1.0 / DELI
890      RDELJ = 1.0 / DELJ
900      RDELK = 1.0 / DELK
910      NORM=N
920      IF (IOPTBC.EQ.1) NORM=N+1
930      NORMB=4
940      IF (IOPTBC.EQ.1) NORMB=2
950      IF (IOPTDZ.EQ.0) THEN
960      1      DO 20 K=1,KMAX
970      2 V      DZ(K)=DELZ
980      2 V      20 CONTINUE
990      1      END IF
1000      DZ(1)=DZ(2)
1010      DZ(1)=DZ(2)
1020      DZ(0)=DZ(1)
1030      DZ(KMAX)=DZ(KM1)
1040      DZ(KMAX+1)=DZ(KMAX)
1050      RAMX(0)=0.0
1060      DO 10 MI=1,MH
1070      1 S      D=SIN(PI*MI/M)/DELX
1080      1 S      10 RAMX(MI)=4.0*D*D
1090      DO 11 NJ=1,N
1100      1 S      D=SIN(PI*(2*NJ-1)/(4*N))/DELY
1110      1 S      IF (IOPTBC.EQ.1) D=SIN(PI*NJ/(2*(N+1)))/DELY
1120      1 S      11 RAMY(NJ)=4.*D*D
1130      DO 12 K=1,KM1
1140      1      D1=(DZ(K)+DZ(K-1))/2
1150      1      D2=(DZ(K)+DZ(K+1))/2
1160      1      D3=D1+D2
1170      1      AK(K)=2./(D2*D3)
1180      1      CK(K)=2./(D1*D3)
1190      1      AK(K)=1./(DZ(K)*D2)
1200      1      CK(K)=1./(DZ(K)*D1)
1210      1      D4=1./DZ(K) ; D5=1./D1 ; D6=1./D2
1220      1      DO 13 NJ=1,N
1230      2      DO 13 MI=0,MH
1240      3 V      UK(MI,NJ,1)=1.
1250      3 V      VK(MI,NJ,1)=0.0
1260      3 V      VKB(MI,NJ,1)=0.0
1270      3 V C      13 BK(MI,NJ,K)=- (RAMX(MI)+RAMY(NJ)+2./D1/D2)
1280      3 V      13 BK(MI,NJ,K)=- (RAMX(MI)+RAMY(NJ)+D4*(D5+D6))
1290      1      12 CONTINUE
1300      DO 14 MI=0,MH
1310      1      DO 14 NJ=1,N
1320      2      DO 14 K=2,KM1
1330      3 S      14 UK(MI,NJ,K)=-AK(K)/(CK(K)*UK(MI,NJ,K-1)+BK(MI,NJ,K))
1340      DO 150 NJ=1,N
1350      1 V      150 XQ(NJ)=1.0
1360      CALL DFCQFT(XQ,N,IW,W1,IERR)

```

```

1370      CALL DFSIBF(XQ,N,IWSI,WISI,IERR)
1380      DO 152 M1=1,M
1390 1 V 152      AX(M1)=1.0
1400      CALL DFRFFT(AX,M,AF,BF,MH,IW1,W11,IERR)
1410      DO 151 K1=1,M
1420 1 V      AF(K1)=1.0
1430 1 V      BF(K1)=1.0
1440 1 V 151      CONTINUE
1450      CALL DFRFBT(AF,BF,MH,AX,M,IW1,W11,IERR)
1460      DO 154 LJ=1,N
1470 1 V 154      XQ(LJ)=1.0
1480      CALL DFCQBT(XQ,N,IW,W1,IERR)
1490      C      CORRECTION OF S(I,J,K) IN CONNECTION TO NEUMANN TYPE B.C.
1500      DO 160 I=2,IM1
1510 1      DO 160 J=2,JM1
1520 2 V      S(I,J,2)=S(I,J,K)+DPDZ1(I,J)/DZ(1)
1530 2 V      S(I,J,KM1)=S(I,J,KM1)-DPDZ2(I,J)/DZ(KM1)
1540 2 V 160      CONTINUE
1550      IF(IPTBC.EQ.0) THEN
1560 1      DO 161 I=2,IM1
1570 2      DO 161 K=2,KM1
1580 3 V C      DDD=2*DPDY1(I,K)
1590 3 V      DDD=2*PIN(I,K)
1600 3 V      S(I,2,K)=S(I,2,K)+DDD/DELY
1610 3 V      S(I,JM1,K)=S(I,JM1,K)-POUT(I,K)/DELY/DELY
1620 3 V 161      CONTINUE
1630 1      ELSE
1640 1      DO 162 I=2,IM1
1650 2      DO 162 K=2,KM1
1660 3 V      S(I,2,K)=S(I,2,K)-PIN(I,K)/DELY/DELY
1670 3 V      S(I,JM1,K)=S(I,JM1,K)-POUT(I,K)/DELY/DELY
1680 3 V 162      CONTINUE
1690 1      END IF
1700      C      &&&& FOURIE TRANSFORM OF S(I,J) &&&&
1710      C      &&&&&& SA(K1,KJ,K) = QA(MU,NU,Z) &&&&&&
1720      C      SA(K1,LJ,K)=SIGMA (S(I,J,K)) * EXP(-2.PAI.1.1.KI/M - 2.PAI.1.1.J
1730      DO 45 K=2,KM1
1740 1      DO 50 I=2,IM1
1750 2      DO 60 NJ=1,N
1760 3 V 60      XQ(NJ)=S(I,NJ+1,K)
1770 2      IF(IPTBC.EQ.0) CALL DFCQTF(XQ,N,IW,W1,IERR)
1780 2      IF(IPTBC.EQ.1) CALL DFSIBF(XQ,N,IWSI,WISI,IERR)
1790 2      DO 61 LJ=1,N
1800 3 S 61      SSAQ(I,LJ)=XQ(LJ)/NORM
1810 2      CONTINUE
1820 1      DO 51 LJ=1,N
1830 2      DO 62 M1=1,M
1840 3 V 62      AX(M1)=SSAQ(M1+1,LJ)
1850 2      CALL DFRFTF(AX,M,AF,BF,MH,IW1,W11,IERR)
1860 2      SA(0,LJ,K)=AF(0)
1870 2      SB(0,LJ,K)=0.0
1880 2      DO 63 K1=1,MH
1890 3 V      SA(K1,LJ,K)=AF(K1)
1900 3 V      SB(K1,LJ,K)=BF(K1)
1910 3 V 63      CONTINUE
1920 2      SB(MH,LJ,K)=0.0
1930 2      C      TEMP. . . .
1940 2      51      CONTINUE
1950 1      45      CONTINUE
1960      DO 70 M1=0,MH
1970 1      DO 70 NJ=1,N
1980 2      DO 70 K=2,KM1
1990 3 S      DB=CK(K)*VKB(M1,NJ,K-1) - SB(M1,NJ,K)
2000 3 S      VKB(M1,NJ,K)=UK(M1,NJ,K)*DB/AK(K)
2010 3 S      DA=CK(K)*VK(M1,NJ,K-1)-SA(M1,NJ,K)
2020 3 S      VK(M1,NJ,K)=UK(M1,NJ,K)*DA/AK(K)
2030      C      "*****" FOURIE TRANSFORM OF PRESS. P BY POISSON EQ. "*****"
2040      DO 71 M1=0,MH
2050 1      DO 71 NJ=1,N
2060 2 V      PA(M1,NJ,KMAX)=VK(M1,NJ,KM1)/(1.-UK(M1,NJ,KM1))
2070 2 V      PB(M1,NJ,KMAX)=VKB(M1,NJ,KM1)/(1.-UK(M1,NJ,KM1))
2080 2 V 71      CONTINUE
2090      DO 73 M1=0,MH
2100 1      DO 73 NJ=1,N
2110 2      DO 73 KK=2,KM1
2120 3 V      K=KM1-KK+2
2130 3 V      PA(M1,NJ,K)=UK(M1,NJ,K)*PA(M1,NJ,K+1)+VKB(M1,NJ,K)
2140 3 V      PB(M1,NJ,K)=UK(M1,NJ,K)*PB(M1,NJ,K+1)+VKB(M1,NJ,K)

```

```

2150 3 V 73 CONTINUE
2160 C PA(0,1,KM1)=PAVE
2170 C PB(0,1,KM1)=PAVE
2180 C PA(0,1,KMAX)=PAVE
2190 C PB(0,1,KMAX)=PAVE
2200 DO 75 KK=2,KM2
2210 1 V K=KM2-KK+2
2220 1 V PA(0,1,K)=UK(0,1,K)*PA(0,1,K+1)+VK(0,1,K)
2230 1 V 75 PB(0,1,K)=UK(0,1,K)*PB(0,1,K+1)+VKB(0,1,K)
2240 C """""" INVERSE FOURIE TRANSFORM OF PA(KI,LJ,K) """"""
2250 C WRITE(6,*) SA(1,1,2),PA(1,1,2),PA(2,2,2)
2260 DO 77 K=2,KM1
2270 1 DO 80 LJ=1,N
2280 2 AF(0)=PA(0,LJ,K)
2290 2 DO 81 KI=1,M
2300 3 V AF(KI)=PA(KI,LJ,K)
2310 3 V BF(KI)=PB(KI,LJ,K)
2320 3 V 81 CONTINUE
2330 2 CALL DFRFTB(AF,BF,MH,AX,M,IWI,W1,IERR)
2340 2 DO 82 I=2,IM1
2350 3 V 82 SSA(I,LJ)=AX(I-1)
2360 2 80 CONTINUE
2370 1 DO 83 I=2,IM1
2380 2 DO 84 LJ=1,N
2390 3 V 84 XQ(LJ)=SSA(I,LJ)
2400 2 IF(1OPTBC.EQ.0) CALL DFCQTB(XQ,N,IW,W1,IERR)
2410 2 IF(1OPTBC.EQ.1) CALL DFSIBF(XQ,N,IWS1,W1S1,IERR)
2420 2 DO 85 J=2,JM1
2430 3 S PN(I,J,K)=XQ(J-1)/NORMB
2440 3 S C WRITE(6,*) I,J,K,PN(I,J,K),S(I,J,K),SA(I-1,J-1,K),
2450 3 S C & PA(I-1,J,K)
2460 3 S 85 CONTINUE
2470 2 83 CONTINUE
2480 1 77 CONTINUE
2490 C
2500 C *****SPECIFICATION OF PRESSURE BOUNDARY CONDITION*****
2510 C *****EXIT PRESS. P(I,JMAX,K) CALCULATION*****
2520 C 1) DIRICHLET CONDITION
2530 DO 90 I=2,IM1
2540 1 DO 90 K=2,KM1
2550 2 V PN(I,JMAX,K)=POUT(I,K)
2560 2 V 90 CONTINUE
2570 C ---- INLET PRESSURE ----
2580 IF(1OPTBC.EQ.0) THEN
2590 1 DO 95 I=2,IM1
2600 2 DO 95 K=2,KM1
2610 3 V C DDD=2*DPDY1(I,K)
2620 3 V DDD=2*PIN(I,K)
2630 3 V 95 PN(I,1,K)=PN(I,3,K)-DDD*DELY
2640 1 ELSE
2650 1 DO 96 I=2,IM1
2660 2 DO 96 K=2,KM1
2670 3 V 96 PN(I,1,K)=PIN(I,K)
2680 1 END IF
2690 C ....PERIODIC B.C. IN THE X-DIRECTION....
2700 DO 91 K=2,KM1
2710 1 DO 91 J=2,JM1
2720 2 V PN(1,J,K)=PN(IM1,J,K)
2730 2 V PN(IMAX,J,K)=PN(2,J,K)
2740 2 V 91 CONTINUE
2750 C*****END OF PRESS. B.C.*****
2760 END

```

POISNS  
POISND

# SOLUTION OF 3-D POISSON EQUATION BY DIRECTLY SOLVING METHOD (FFT & TDM TECHNIQUE)

直接解法 (FFT & TDM法) による 3 次元ポアソン方程式の解

プログラムの形式 a コンプリートプログラム ⑤ サブルーチン c 関数

著 作 権 者 大阪大学工学部 酒井勝弘 1988 年 1 月 1 日

利 用 者 の 義 務 ② プログラム名と作者名を明記する b 明記の必要なし c その他

ソースプログラムの公表 a 公表する ⑥ 公表しない (当分の間) ③ 相談の上

使 用 機 種 ACOS シリーズ 77 SX シリーズ

使 用 言 語 FORTRAN 77

## § 1 概 要

いくつかの境界条件に対する 3 次元ポアソン方程式 ( $\nabla^2 P = S$ ) の解を求める。高速フーリエ変換法 (FFT) と三重対角行列アルゴリズム (TDM) を併用して反復法に依らず直接解法で解くので高速・高精度 (2 次の差分近似の範囲内に於いて) 計算が可能であり、多大なタイムステップに亘ってポアソン方程式を解くような問題に対して特に有用である<sup>(1)</sup>。

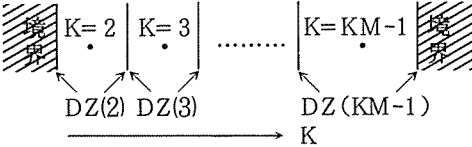
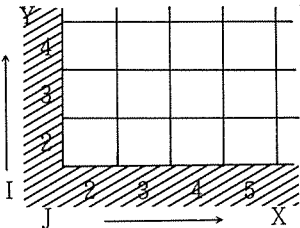
## § 2 使 用 法

(単精度)

```
CALL SPOIS (IM, JM, KM, XT, YT, ZT, IOPTDZ, IOPTBC, PIN,  
POUT, DPDZ1, DPDZ2, S, PN, WK01, WK02, WK03, WK04, WK05, WK06,  
WK07, WK08, WK09, WK09, WK10, WK11, WK12, WK13, WK14, WK15, WK16,  
WK17, WK19, WK20, WK21)
```

(倍精度)

```
CALL DPOIS (引数は SPOIS と同様)
```

引 数	型		種類、寸法	内 容
	SPOIS	DPOIS		
IM	整 数	整 数		X方向メッシュ分割数+2
JM	"	"		Y " "
KM	"	"		Z " "
XT	実 数	倍 精度 実 数 型		X方向全長
YT	"	"		Y " "
ZT	"	"		Z " "
IOPTDZ	整 数	整 数		Z方向メッシュの取り方に関するオプション = 0 : 等間隔メッシュ = 1 : 入力値 (DZ (k))
DZ	実 数	倍 精度 実 数 型	1次元配列 (0 : KM)	Z方向メッシュ巾 ( IOPTDZ= 0 の時は 任意値ない)  D Z(0), DZ(1), DZ (KM)は任意値でよい。
				 { X方向, Y方向もZ方向と同様に、各々 I = 2 ~ IM-1, J = 2 ~ JM-1 が内 点となる。(左図参照)
IOPTBC	整 数	整 数		Y方向境界条件のオプション = 0 : Y方向負側で Neumann型、正側で Dirichlet型 = 1 : Y方向正、負両側で Dirichlet型
PIN	実 数	倍 精度 実 数 型	2次元配列 (IM, KM)	Y方向負側境界条件 (Neumann 型の場合 は微係数)
POUT	"	"	"	Y方向正側境界条件 ( " )
DPDZ1	"	"	"	Z方向負側の Neumann 型境界条件
DPDZ2	"	"	2次元配列 (IM, JM)	" 正 "
S	"	"	3次元配列 (IM, JM, KM)	ポアソン方程式のソース項

(Continued)

引 数	型		種 類 , 寸 法	内 容
	SPOIS	DPOIS		
PN	実 数	倍 精 度 実 数 型	3 次元配列 (0:IM, 0:JM, 0:KM)	ポアソン方程式の解 ( $\nabla^2(PN) = S$ )
WK 01	"	"	1 次元配列 (IM)	作業領域
WK 02	"	"	2 次元配列 (0:IM, JM)	"
WK 03	"	"	1 次元配列 (3*JM)	"
WK 04	"	"	1 次元配列 (JM)	"
WK 05	"	"	1 次元配列 (4*JM)	"
WK 06	"	"	1 次元配列 (3*IM)	"
WK 07	"	"	3 次元配列 (0:IM, JM, KM)	"
WK 08	"	"	3 次元配列 (0:IM, JM, KM)	"
WK 09	"	"	3 次元配列 (0:IM, JM, KM)	"
WK 10	"	"	1 次元配列 (0:IM)	"
WK 11	"	"	1 次元配列 (0:JM)	"
WK 12	"	"	1 次元配列 (KM)	"
WK 13	"	"	3 次元配列 (0:IM, JM, KM)	"
WK 14	"	"	1 次元配列 (KM)	"
WK 15	"	"	1 次元配列 (IM)	"
WK 16	"	"	1 次元配列 (IM)	"
WK 17	"	"	3 次元配列 (0:IM, 0:JM, 0:KM)	"
WK 18	"	"	"	"
WK 19	"	"	"	"
WK 20	"	"	"	"
WK 21	"	"	2 次元配列 (0:IM, 0:JM)	"

### 3 出 力

計算体系の全ての内点に対してポアソン方程式の解 ( $((PN(I, J, K), I = 2, IM-1),$   
 $J = 2, JM-1), K = 2, KM-1)$  が SPOIS 又は DPOIS より得られるので、ユーザが  
 適当にプリントアウトすればよい。

#### 4 性 能

科学技術計算に於いて頻出する3次元ポアソン方程式を、高速フーリエ変換法と三重対角行列アルゴリズム法を併用することによって直接解法で高速・高精度に解く機能を有する。即ち、X、Y方向にはその方向の境界条件を満足する離散型フーリエ級数で展開し、その展開係数をZ方向の境界条件を満足するように三重対角行列アルゴリズムによって解き、然る後にフーリエ逆変換を行って任意位置のポアソン解を求めている。

このように本サブルーチンは高速・高精度演算を本来の目的としている為、計算体系やメッシュのとり方には制約条件がある。又現在取扱うことのできる境界条件の組み合わせについても、以下の制限があるが他の境界条件の取扱いについては若干の追加作業により可能である。

##### 1) 計算体系及びメッシュ体系

計算体系は直方体系で、X、Y方向には等間隔メッシュに固定、Z方向には不等間隔メッシュが可能。

##### 2) 境界条件

X方向には、周期条件。

Y方向には、①両端でDirichlet型、又は、②負側境界でNeumann型、正側境界でDirichlet型の2種類の境界条件が設定できる。

Z方向には、両端でNeumann型。

#### 5 備 考

フーリエ変換はFFT法によるNEC開発科学技術計算ライブラリ(ASL)<sup>(2)</sup>に基づいており、又単精度計算(SPOIS)と倍精度計算(DPOIS)が可能で各々でライブラリを使い分けている。

計算精度に関しては、POISSON方程式を離散化する際の打ち切り誤差及び計算機の丸め誤差の2種類が一般に考えられる。前者については、本ルーチンでは2次精度の中心差分式を使用しているので、打ち切り誤差は $O(\Delta x^2, \Delta y^2, \Delta z^2)$ である。この誤差はメッシュ巾を小さくすることによって、原理的にどんどん小さくできる。丸め誤差に関しては、ACOSの場合単精度計算(SPOIS)で約6桁、倍精度計算(DPOIS)で約12桁の精度である。従って、両者(打ち切り誤差と丸め誤差)のより大きい方で計算精度は律則される。

## 6 使用例

計算の使用例を次に示す。

```
PROGRAM POISSN
PARAMETER IM=6, JM=12, KM=7
DIMENSION PA(0:IM,0:JM,0:KM),SA(0:IM,0:JM,0:KM),SSA(0:IM,0:JM)
DIMENSION PB(0:IM,0:JM,0:KM),SB(0:IM,0:JM,0:KM),AF(0:IM),BF(IM)
DIMENSION PN(0:IM,0:JM,0:KM),S(IM,JM,KM)
DIMENSION DZ(0:KM),AK(KM),BK(0:IM,JM,KM),CK(KM),RAMX(0:IM)
DIMENSION RAMY(0:JM),VKB(0:IM,JM,KM),AX(IM)
DIMENSION UK(0:IM,JM,KM),VK(0:IM,JM,KM)
DIMENSION W1I(3*IM),W1SI(4*JM)
DIMENSION XQ(JM),W1(3*JM),SSAQ(0:IM,JM)
DIMENSION DPDZ1(IM,JM),DPDZ2(IM,JM)
DIMENSION PIN(IM,KM),POUT(IM,KM)
NAMELIST /INPT/NDIVX,NDIVY,NDIVZ,XT,YT,ZT,IOPTBC,IOPTDZ,
& DZ,PIN,POUT,DPDZ1,DPDZ2,S,ISKIP,JSKIP,KSKIP
READ(5,INPT)
IMAX=IM; JMAX=JM; KMAX=KM
IM1=IMAX-1; JM1=JMAX-1; KM1=KMAX-1
CALL SPOIS(IMAX,JMAX,KMAX,XT,YT,ZT,IOPTDZ,
& DZ,IOPTBC,PIN,POUT,DPDZ1,DPDZ2,S,PN,
& AX,SSAQ,W1,XQ,W1SI,W1I,VKB,VK,UK,
& RAMX,RAMY,AK,BK,CK,AF,BF,SA,SB,PA,PB,SSA)
WRITE(6,8010)
DO 8100 I=2,IM1,ISKIP
DO 8100 K=2,KM1,KSKIP
KK=K+KSKIP
WRITE(6,8012)
DO 8100 J=1,JMAX,JSKIP
WRITE(6,8040) I,K,J,PN(I,J,K)
8100 CONTINUE
8010 FORMAT(/2X,' I',' K',' J',8X,'P')
8012 FORMAT(1H )
8040 FORMAT(2X,I3,I3,I3,2X,1PE12.5)
STOP
END
```

## 参考文献

- 1) K. Sakai and T. Sekiya, "Numerical Simulations of Turbulent Fluid Flows. I—Fast Fourier Transform Method—, Tech. Repts. Osaka Univ., 34 Oct. (1984) 193—200.
- 2) NEC, "SX ソフトウェア科学技術計算ライブラリ説明書"  
<ASL/SX 第2分冊>