OUKA
The University of Osaka
Institutional Knowledge Archive

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	https://hdl.handle.net/11094/65779
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[1)]。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[1)]

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

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

$$P = P^{\circ} + P^{*}. \qquad (1b)$$

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

即ち $\int_A \nabla p|_B \ \vec{n}\,dA = \int_V Sdv$ 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。

IHBC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°を用いてP*に対するmodified Poisson equation (2)が得られる。

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

$$S^* \equiv S - V^2 P^\circ \qquad (2b)$$

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

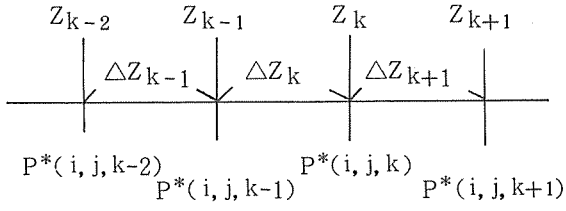
まず、ラプラス演算子∇^2を2次精度の中心差分スキームによって次のように離散化する。（ここでは、x、y方向には等間隔メッシュ、z方向には不等間隔メッシュとする）

$$\nabla^2 P^* = \frac{P^*(i+1,j,k) - 2P^*(i,j,k) + P^*(i-1,j,k)}{\triangle x^2}$$

$$+ \frac{P^*(i,j+1,k) - 2P^*(i,j,k) + P^*(i,j-1,k)}{\triangle y^2} + \frac{2P^*(i,j,k+1)}{\triangle Z_{k+1}(\triangle Z_k + \triangle Z_{k+1})}$$

$$- \frac{2P^*(i,j,k)}{\triangle Z_k \triangle Z_{k+1}} + \frac{2P^*(i,j,k-1)}{\triangle Z_k(\triangle Z_k + \triangle Z_{k+1})} \qquad (3)$$

$\triangle Z_k$ 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。

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

$$\left(\begin{matrix}1 \leqq i \leqq N_1 \\ 1 \leqq i \leqq N_2\end{matrix}\right) \cdots\cdots (4)$$

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、 $P^*(l, j, k) = P^*(N_1+1, j, k)$、$P^*(i, N_2+1, k) = 0$

(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。

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

$$-(\lambda\mu^2+\lambda\nu^2)\,\widetilde{P}^*(\mu,\nu,k)=\widetilde{S}^*(\mu,\nu,k),\quad \begin{pmatrix}1\leqq\mu\leqq N_1\\ 1\leqq\nu\leqq N_2\end{pmatrix}$$

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

$\widetilde{S}^*(\mu,\nu,k)$ 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 によって遂次的に解く事ができる。即ち、

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

ここで、

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

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

$$C_k=\frac{2}{\triangle Z_k(\triangle Z_k+\triangle Z_{k+1})}) \qquad (8)$$

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、

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

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

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

及び $\widetilde{P}^*(\mu,\nu,N_3+1)=V_{\mu\nu N_3}/(1-U_{\mu\nu N_3})$ (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[2] 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分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方向ー周期条件

Y方向ー負側境界で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方向ー両端で$\partial P/\partial Z=0$

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,

△X＝1.0, △Y＝1.0, △Z＝1.0

4）解析解：P(y)＝12－y, y＝(J－1)△Y＝J－1

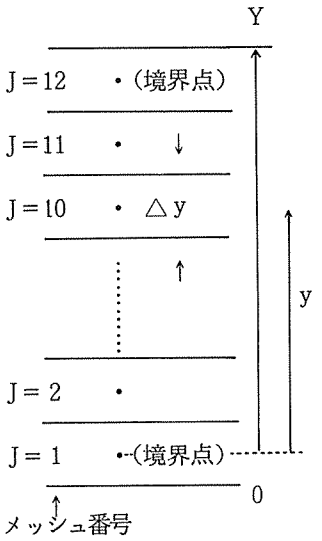
S＝0でx, z方向の境界条件が両側で対称であるので、y方向一次元問題となる。この問題は平行壁間2次元ポアズイユフローの圧力場を解くのと同一問題である。

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。



第2図　y方向メッシュ図

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。

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。

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イ説明書 <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。

```
      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 DPOIS (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
C      SUBPROGRAME OF POISSON SOLVER
      SUBROUTINE DPOIS (IM,JM,KM,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)
C     ********** POISSON-3D  FOR ACOS-1000 **********
      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 IW(15),IWI(15),W1I(3*IM)
      DIMENSION IWSI(15),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)
C
C     CORRESPONDENCE BETWEEN (MU,NU,K)  AND (MI,NJ,K)
C    (MU=0,MI=1)   (MU=N1-1,MI=M)
C    (NU=0,NJ=1)   (NU=N2-1,NJ=N)
C    (K=1 ,K=2 )   (K=N3  ,K=KM1)
C
      PAI=4.0*ATAN(1.0)
      PAI2=PAI*PAI
      NDIVX=IM-2; NDIVY=JM-2; NDIVZ=KM-2
      M=NDIVX
      N=NDIVY
      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(PAI*MI/M)/DELX
1080    1 S      10 RAMX(MI)=4.0*D*D
1090               DO 11 NJ=1,N
1100    1 S          D=SIN(PAI*(2*NJ-1)/(4*N))/DELY
1110    1 S          IF(IOPTBC.EQ.1) D=SIN(PAI*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 DFSIFB(XQ,N,IWSI,W1SI,IERR)
1380                      DO 152 MI=1,M
1390   1 V    152         AX(MI)=1.0
1400                      CALL DFRFFT(AX,M,AF,BF,MH,IWI,W1I,IERR)
1410                      DO 151 KI=1,M
1420   1 V                  AF(KI)=1.0
1430   1 V                  BF(KI)=1.0
1440   1 V    151         CONTINUE
1450                      CALL DFRFBT(AF,BF,MH,AX,M,IWI,W1I,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(IOPTBC.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(KI,KJ,K) = QA(MU,NU,Z)  ******
1720        C          SA(KI,LJ,K)=SIGMA (S(I,J,K)) * EXP(-2.PAI.I.I.KI/M - 2.PAI.I.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(IOPTBC.EQ.0) CALL DFCQTF(XQ,N,IW,W1,IERR)
1780   2                   IF(IOPTBC.EQ.1) CALL DFSIBF(XQ,N,IWSI,W1SI,IERR)
1790   2                   DO 61 LJ=1,N
1800   3 S      61         SSAQ(I,LJ)=XQ(LJ)/NORM
1810   2        50       CONTINUE
1820   1                  DO 51 LJ=1,N
1830   2                    DO 62 MI=1,M
1840   3 V      62          AX(MI)=SSAQ(MI+1,LJ)
1850   2                    CALL DFRFTF(AX,M,AF,BF,MH,IWI,W1I,IERR)
1860   2                    SA(0,LJ,K)=AF(0)
1870   2                    SB(0,LJ,K)=0.0
1880   2                    DO 63 KI=1,MH
1890   3 V                    SA(KI,LJ,K)=AF(KI)
1900   3 V                    SB(KI,LJ,K)=BF(KI)
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 MI=0,MH
1970   1                  DO 70 NJ=1,N
1980   2                    DO 70 K =2,KM1
1990   3 S                    DB=CK(K)*VKB(MI,NJ,K-1) - SB(MI,NJ,K)
2000   3 S                    VKB(MI,NJ,K)=UK(MI,NJ,K)*DB/AK(K)
2010   3 S                    DA=CK(K)*VK(MI,NJ,K-1)-SA(MI,NJ,K)
2020   3 S      70     VK(MI,NJ,K)=UK(MI,NJ,K)*DA/AK(K)
2030        C    """""" FOURIE TRANSFORM OF PRESS. P BY POISSON EQ. """""""
2040                   DO 71 MI=0,MH
2050   1                 DO 71 NJ=1,N
2060   2 V                 PA(MI,NJ,KMAX)=VK(MI,NJ,KM1)/(1.-UK(MI,NJ,KM1))
2070   2 V                 PB(MI,NJ,KMAX)=VKB(MI,NJ,KM1)/(1.-UK(MI,NJ,KM1))
2080   2 V      71     CONTINUE
2090                   DO 73 MI=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(MI,NJ,K)=UK(MI,NJ,K)*PA(MI,NJ,K+1)+VK(MI,NJ,K)
2140   3 V                   PB(MI,NJ,K)=UK(MI,NJ,K)*PB(MI,NJ,K+1)+VKB(MI,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,WI1,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(IOPTBC.EQ.0) CALL DFCQTB(XQ,N,IW,W1,IERR)
2410   2                   IF(IOPTBC.EQ.1) CALL DFSIBF(XQ,N,IWSI,W1SI,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(IOPTBC.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 TEQNIQUE)

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　ⓑ 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　ⓐ 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　ⓑ 公表しない（当分の間）　ⓒ 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。[1]

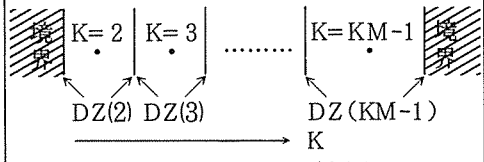
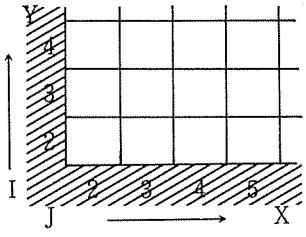
§2 使用法

（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)

（倍数度）

CALL DPOIS（引数はSPOISと同様）

引数	型 SPOIS	型 DPOIS	種類、寸法	内容
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）  DZ(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 (∇^2(PN)= S)
WK01	〃	〃	1次元配列 (IM)	作業領域
WK02	〃	〃	2次元配列 (0:IM, JM)	〃
WK03	〃	〃	1次元配列 (3*JM)	〃
WK04	〃	〃	1次元配列 (JM)	〃
WK05	〃	〃	1次元配列 (4*JM)	〃
WK06	〃	〃	1次元配列 (3*IM)	〃
WK07	〃	〃	3次元配列 (0:IM, JM, KM)	〃
WK08	〃	〃	3次元配列 (0:IM, JM, KM)	〃
WK09	〃	〃	3次元配列 (0:IM, JM, KM)	〃
WK10	〃	〃	1次元配列 (0:IM)	〃
WK11	〃	〃	1次元配列 (0:JM)	〃
WK12	〃	〃	1次元配列 (KM)	〃
WK13	〃	〃	3次元配列 (0:IM, JM, KM)	〃
WK14	〃	〃	1次元配列 (KM)	〃
WK15	〃	〃	1次元配列 (IM)	〃
WK16	〃	〃	1次元配列 (IM)	〃
WK17	〃	〃	3次元配列 (0:IM, 0:JM, 0:KM)	〃
WK18	〃	〃	〃	〃
WK19	〃	〃	〃	〃
WK20	〃	〃	〃	〃
WK21	〃	〃	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イ（ＡＳＬ）[(2)]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イを使い分けている。

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$O(\triangle x^2, \triangle y^2, \triangle z^2)$である。この誤差はメッシュ巾を小さくとることによって、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, "Nemerical Simulations of Turbulent Fluid Flows. I－Fast Fourier Transform Method－, Tech. Repts. Osaka Univ., 34 Oct. (1984) 193－200.

2) NEC, "SX ソフトウエア科学技術計算ライブラリイ説明書"
＜ASL／SX 第2分冊＞