Fortran 90 数値解析ライブラリ (STPK) マニュアル (Ver.1.0)

辻野智紀

平成 23 年 11 月 3 日

目 次

0.1 ポアソン方程式の計算

ここでは、2 次元デカルト座標系におけるポアソン方程式の離散化を定式化する。基礎となる方程式は以下である。

$$a(x,y)\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+b(x,y)\frac{\partial^2\psi}{\partial x\partial y}+c(x,y)\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}+d(x,y)\frac{\partial\psi}{\partial x}+e(x,y)\frac{\partial\psi}{\partial y}=\rho(x,y). \tag{0.1.1}$$

ここで、x,y は座標変数、$\psi=\psi(x,y)$ は求める解、$\rho(x,y)$ はポアソン方程式の強制、a,b,c,d,e は各係数である。ルーチンでは、これらの係数を引数として与えることで、計算したい方程式系を陽に指定することができるようにしてある。以下の離散化において、x,y 方向の離散要素をそれぞれ i,j とする。また、各微分は 2 次精度の中心差分スキームを用いて評価することにする。このとき、各項を離散化すると、

$$\begin{aligned}
&f(x,y)=f_{i,j}\\
&\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}=\frac{\psi_{i+1,j}+\psi_{i-1,j}-2\psi_{i,j}}{\Delta x^2},\\
&\frac{\partial^2\psi}{\partial x\partial y}=\frac{1}{4\Delta x\Delta y}\left\{\psi_{i+1,j+1}+\psi_{i-1,j-1}-(\psi_{i-1,j+1}+\psi_{i+1,j-1})\right\}\\
&\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}=\frac{\psi_{i,j+1}+\psi_{i,j-1}-2\psi_{i,j}}{\Delta y^2},\\
&\frac{\partial\psi}{\partial x}=\frac{\psi_{i+1,j}-\psi_{i-1,j}}{2\Delta x}\\
&\frac{\partial\psi}{\partial y}=\frac{\psi_{i,j+1}-\psi_{i,j-1}}{2\Delta y}
\end{aligned} \tag{0.1.2}$$

となる。ここで、f は任意のスカラー変数であり、微分に係る係数、強制項はすべてこれで評価した。また、b の項についての計算は、

$$\begin{aligned}
\frac{\partial^2\psi}{\partial x\partial y}&=\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial\psi}{\partial y}\right)\\
&=\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\psi_{i,j+1}-\psi_{\psi_{i,j-1}}}{2\Delta y}\right)\\
&=\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\psi_{i,j+1}}{2\Delta y}\right)-\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\psi_{i,j-1}}{2\Delta y}\right)\\
&=\frac{1}{2\Delta x}\left(\frac{\psi_{i+1,j+1}-\psi_{i-1,j+1}}{2\Delta y}\right)-\frac{1}{2\Delta x}\left(\frac{\psi_{i+1,j-1}-\psi_{i-1,j-1}}{2\Delta y}\right)
\end{aligned}$$

という過程を経て計算したものである。なお、本ルーチンは不等間隔座標にも対応しており、実際の計算では

$$\Delta x=\Delta x_i=0.5\times(x(i+1)-x(i-1)),\quad \Delta y=\Delta y_j=0.5\times(y(j+1)-y(j-1))$$

という計算を行っている。(0.1.2) 式を用いると、(0.1.1) 式は

$$
\begin{aligned}
& a_{i,j}\frac{\psi_{i+1,j}+\psi_{i-1,j}-2\psi_{i,j}}{\Delta x^2} \\
& + b_{i,j}\frac{1}{4\Delta x\Delta y}\left\{\psi_{i+1,j+1}+\psi_{i-1,j-1}-(\psi_{i-1,j+1}+\psi_{i+1,j-1})\right\} \\
& + c_{i,j}\frac{\psi_{i,j+1}+\psi_{i,j-1}-2\psi_{i,j}}{\Delta y^2} \\
& + d_{i,j}\frac{\psi_{i+1,j}-\psi_{i-1,j}}{2\Delta x} \\
& + e_{i,j}\frac{\psi_{i,j+1}-\psi_{i,j-1}}{2\Delta y} \\
& = \rho_{i,j}.
\end{aligned}
\tag{0.1.3}
$$

となる。これを、反復法が使える形に直すと、

$$
\begin{aligned}
\psi_{i,j} = & \left\{2\left(\frac{a_{i,j}}{\Delta x^2}+\frac{c_{i,j}}{\Delta y^2}\right)\right\}^{-1}\times \\
& \left[\psi_{i+1,j}\left(\frac{a_{i,j}}{\Delta x^2}+\frac{d_{i,j}}{2\Delta x}\right)+\psi_{i,j+1}\left(\frac{c_{i,j}}{\Delta y^2}+\frac{e_{i,j}}{2\Delta y}\right)\right. \\
& +\psi_{i-1,j}\left(\frac{a_{i,j}}{\Delta x^2}-\frac{d_{i,j}}{2\Delta x}\right)+\psi_{i,j-1}\left(\frac{c_{i,j}}{\Delta y^2}-\frac{e_{i,j}}{2\Delta y}\right) \\
& +\frac{b_{i,j}}{4\Delta x\Delta y}\left\{\psi_{i+1,j+1}+\psi_{i-1,j-1}-(\psi_{i-1,j+1}+\psi_{i+1,j-1})\right\} \\
& \left.-\rho_{i,j}\right]
\end{aligned}
\tag{0.1.4}
$$

となり、ポアソンソルバでは、この式を用いて計算を行っている。

a