スペクトル法による Poisson 方程式の数値解析

沼田 龍介
The Australian National University

平成 17 年 11 月 7 日

1 解析解

2 次元矩形領域 $\mathcal{D} = \{x, y : -L_x \leq x \leq L_x, -L_y \leq y \leq L_y\}$ において、

$$-\Delta\phi(x, y) = \omega(x, y) \tag{1}$$

を考える。y 方向は周期境界、x 方向には固定境界条件

$$\phi(\pm L_x, y) = f_\pm(y) \tag{2}$$

とする。y 方向に周期的であるから、Fourier 級数に展開すると、

$$\phi(x, y) = \sum_{n_y=-\infty}^{\infty} \bar{\phi}(x, k_y) e^{\mathrm{i}\frac{n_y\pi}{L_y}y} = \sum_{n_y=-\infty}^{\infty} \bar{\phi}(x, k_y) e^{\mathrm{i}k_y y} \tag{3}$$

以下、$k_y = n_y\pi/L_y$ とする。$\bar{\phi}$ は以下で与えられる。

$$\bar{\phi}(x, k_y) = \frac{1}{2L_y} \int_{-L_y}^{L_y} \phi(x, y) e^{-\mathrm{i}k_y y} \mathrm{d}y. \tag{4}$$

ω, $f_\pm$ についても同様に展開すると、

$$\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} - k_y^2\right) \bar{\phi}(x, k_y) = -\bar{\omega}(x, k_y) \tag{5}$$

$$\bar{\phi}(\pm L_x) = \bar{f}_\pm \tag{6}$$

となる。

以下で与えられる Green 関数を定義する。

$$\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} - k_y^2\right) G(x; \xi) = -\delta(x - \xi) \tag{7}$$

$$G(\pm L_x; \xi) = 0 \tag{8}$$

ここで $x' = x + L_x$, $\xi' = \xi + L_x$ と変数変換すると、

$$\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x'^2} - k_y^2\right) G'(x'; \xi') = -\delta(x' - \xi') \tag{9}$$

$$G'(0; \xi') = G'(2L_x; \xi') = 0 \tag{10}$$

ただし、$G'(x';\xi')=G(x;\xi)$ とした。境界条件を考慮して sin 級数に展開すると、

$$\begin{aligned} G'(x';\xi') &= \sum_{n_x=1}^{\infty} \bar{G}'(k'_x;\xi')\sin k'_x x' && (11)\\ \bar{G}'(k'_x;\xi') &= \frac{1}{L_x}\int_0^{2L_x} G'(x';\xi')\sin k'_x x' \mathrm{d}x' && (12)\end{aligned}$$

ただし、$k'_x=\frac{n_x\pi}{2L_x}$。δ-関数も同様に展開すると

$$\frac{1}{L_x}\int_0^{2L_x}\delta(x'-\xi')\sin k'_x x'\mathrm{d}x=\frac{1}{L_x}\sin k'_x\xi' \tag{13}$$

より

$$\delta(x'-\xi')=\sum_{n_x=1}^{\infty}\frac{1}{L_x}\sin k'_x x'\sin k'_x\xi'. \tag{14}$$

これらの展開を (9) に代入すると、

$$-\sum_{n_x=1}^{\infty}\left(k'^2_x+k^2_y\right)\bar{G}'(k'_x;\xi')\sin k'_x x'=-\sum_{n_x=1}^{\infty}\frac{1}{L_x}\sin k'_x x'\sin k'_x\xi' \tag{15}$$

よって

$$\bar{G}'(k'_x;\xi')=\frac{1}{L_x}\frac{1}{k'^2_x+k^2_y}\sin k'_x\xi'. \tag{16}$$

(11) に代入して

$$G'(x';\xi')=\sum_{n_x=1}^{\infty}\frac{1}{L_x}\frac{1}{k'^2_x+k^2_y}\sin k'_x x'\sin k'_x\xi' \tag{17}$$

を得る。$x=x'+L_x,\ \xi=\xi'+L_x$ として座標変換すると

$$\begin{aligned} G'(x';\xi') &= \sum_{n_x=1}^{\infty}\frac{1}{L_x}\frac{1}{k'^2_x+k^2_y}\sin k'_x x'\sin k'_x\xi'\\ &= \sum_{n_x=1}^{\infty}\frac{1}{L_x}\frac{1}{k'^2_x+k^2_y}\sin k'_x(x+L_x)\sin k'_x(\xi'+L_x)\\ &= \sum_{n_x=1}^{\infty}\frac{1}{L_x}\frac{1}{k'^2_x+k^2_y}\sin\left(k'_x x+\frac{\pi}{2}n_x\right)\sin\left(k'_x\xi+\frac{\pi}{2}n_x\right)\\ &= \sum_{n_x=1}^{\infty}\frac{1}{L_x}\frac{1}{k'^2_x+k^2_y}\frac{1}{2}\left[\cos k'_x(x+\xi)-(-1)^{n_x}\cos k'_x(x-\xi)\right]\\ &= \sum_{n_x=\mathrm{odd}}\frac{1}{L_x}\frac{1}{k'^2_x+k^2_y}\cos k'_x x\cos k'_x\xi-\sum_{n_x=\mathrm{even}}\frac{1}{L_x}\frac{1}{k'^2_x+k^2_y}\sin k'_x x\sin k'_x\xi. && (18)\end{aligned}$$

よって

$$G(x;\xi)=\sum_{n_x=\mathrm{odd}}\frac{1}{L_x}\frac{1}{k'^2_x+k^2_y}\cos k'_x x\cos k'_x\xi-\sum_{n_x=\mathrm{even}}\frac{1}{L_x}\frac{1}{k'^2_x+k^2_y}\sin k'_x x\sin k'_x\xi. \tag{19}$$

以下、x' の空間で考えると (20)(21) は

$$\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x'^2} - k_y^2\right)\bar{\phi}'(x', k_y) = -\bar{\omega}'(x', k_y) \tag{20}$$

$$\bar{\phi}'(0) = \bar{\phi}'(2L_x) = \bar{f}_\pm. \tag{21}$$

Green の公式

$$\int_{-L_x}^{L_x}\left[u\left(\frac{\mathrm{d}^2 v}{\mathrm{d}x^2} - k_y^2 v\right) - v\left(\frac{\mathrm{d}^2 u}{\mathrm{d}x^2} - k_y u\right)\right]\mathrm{d}x \tag{22}$$

$$= \left[u\frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}x} - v\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x}\right]_{-L_x}^{L_x} - \int_{-L_x}^{L_x}\left(\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x}\frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}x} - \frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}x}\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x}\right)\mathrm{d}x = \left[u\frac{\mathrm{d}v}{\mathrm{d}x} - v\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x}\right]_{-L_x}^{L_x} \tag{23}$$

より、$u = \bar{\phi}'$, $v = G'$ とすると

$$\int_0^{2L_x}\left[\bar{\phi}'(-\delta(x' - \xi')) - G'(-\bar{\omega}')\right]\mathrm{d}x' = \left[\bar{\phi}'\frac{\mathrm{d}G'}{\mathrm{d}x'}\right]_0^{2L_x}. \tag{24}$$

よって

$$\bar{\phi}'(\xi') = \int_0^{2L_x} G'(x';\xi')\bar{\omega}'(x')\mathrm{d}x' - \left[\bar{\phi}'(x')\frac{\mathrm{d}G'(x';\xi')}{\mathrm{d}x'}\right]_{x'=0}^{x'=2L_x}. \tag{25}$$

Green 関数の相反性 $G'(x';\xi') = G'(\xi';x')$ を用いて x' と ξ' を交換すると、

$$\bar{\phi}'(x') = \int_0^{2L_x} G'(x';\xi')\bar{\omega}'(\xi')\mathrm{d}\xi' - \left[\bar{\phi}'(\xi')\frac{\mathrm{d}G'(x';\xi')}{\mathrm{d}\xi'}\right]_{\xi'=0}^{\xi'=2L_x}. \tag{26}$$

Green 関数を代入する

$$\begin{aligned}
\bar{\phi}'(x', k_y) &= \int_0^{2L_x}\sum_{n_x=1}^{\infty}\frac{1}{L_x}\frac{1}{k_x'^2 + k_y^2}\sin(k_x'x')\sin(k_x'\xi')\bar{\omega}'(\xi', k_y)\mathrm{d}\xi' \\
&\quad -\bar{\phi}'(2L_x)\sum_{n_x=1}^{\infty}\frac{1}{L_x}\frac{k_x'}{k_x'^2 + k_y^2}\sin(k_x'x')\cos(2k_x'L_x) \\
&\quad +\bar{\phi}'(0)\sum_{n_x=1}^{\infty}\frac{1}{L_x}\frac{k_x'}{k_x'^2 + k_y^2}\sin(k_x'x') \\
&= \frac{1}{L_x}\sum_{n_x=1}^{\infty}\frac{1}{k_x'^2 + k_y^2}\sin k_x'x'\int_0^{2L_x}\bar{\omega}'(\xi', k_y)\sin k_x'\xi'\mathrm{d}\xi' \\
&\quad +\frac{1}{L_x}\sum_{n_x=1}^{\infty}\frac{1}{k_x'^2 + k_y^2}\sin k_x'x'(\bar{\phi}'(0, k_y) - (-1)^{n_x}\bar{\phi}'(2L_x, k_y))
\end{aligned} \tag{27}$$

$\bar{\omega}'$ の sin 級数展開より

$$\tilde{\omega}'(k_x', k_y) = \frac{1}{L_x}\int_0^{2L_x}\bar{\omega}'(\xi', k_y)\sin k_x'\xi'\mathrm{d}\xi'. \tag{28}$$

よって

$$\phi'(x', y) = \sum_{n_x=1}^{\infty}\sum_{n_y=-\infty}^{\infty}\frac{1}{k_x'^2 + k_y^2}\sin(k_x'x')e^{\mathrm{i}k_y y}\left[\tilde{\omega}'(k_x', k_y) + \frac{\bar{\phi}'(0, k_y) - (-1)^{n_x}\bar{\phi}'(2L_x, k_y)}{L_x}\right]. \tag{29}$$

2　数値解析上の注意点

x, k いずれも離散化された Fourier 変換は

$$\begin{aligned}
\tilde{\varphi}(k_m) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\sum_{n=-N_x}^{N_x}\varphi(x_n)e^{\mathrm{i}k_m x_n}\Delta x & (30)\\
\varphi(x_n) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\sum_{m=-M_k}^{M_k}\tilde{\varphi}(k_m)e^{-\mathrm{i}k_m x_n}\Delta k & (31)
\end{aligned}$$

で与えられる。2 階微分の差分表示

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\varphi(x) \equiv \frac{\varphi(x_{n+1}) - 2\varphi(x_n) + \varphi(x_{n-1})}{\Delta x^2} \tag{32}$$

に代入すると

$$\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\varphi &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\sum_{m=-M_k}^{M_k}\left[\tilde{\varphi}(k_m)e^{-\mathrm{i}k_m x_n}\frac{e^{-\mathrm{i}k_m\Delta x} - 2 + e^{\mathrm{i}k_m\Delta x}}{\Delta x^2}\right]\Delta k \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\sum_{m=-M_k}^{M_k}\left[\tilde{\varphi}(k_m)e^{-\mathrm{i}k_m x_n}\left(-k_m^2\left(\frac{\sin(\frac{k_m\Delta x}{2})}{\frac{k_m\Delta x}{2}}\right)^2\right)\right]\Delta k & (33)\\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\sum_{m=-M_k}^{M_k}\left[\tilde{\varphi}(k_m)e^{-\mathrm{i}k_m x_n}\left(-k_m^2\frac{2}{(k_m\Delta x)^2}(1-\cos(k_m\Delta x))\right)\right]\Delta k & (34)
\end{aligned}$$

Poisson 方程式 (1) に離散 Fourier 変換を施すと

$$\left(k_{x,m_x}^2\left(\frac{\sin\left(\frac{k_{x,m_x}\Delta x}{2}\right)}{\frac{k_{y,m_y}\Delta x}{2}}\right)^2 + k_{y,m_y}^2\left(\frac{\sin\left(\frac{k_{y,m_y}\Delta y}{2}\right)}{\frac{k_{y,m_y}\Delta y}{2}}\right)^2\right)\tilde{\phi}(k_{x,m_x}, k_{y,m_y}) = \tilde{\omega}(k_{x,m_x}, k_{y,m_y}) \tag{35}$$

よって

$$\begin{aligned}
\phi(x_{n_x}, y_{n_y}) = {} & \frac{\Delta k_x \Delta k_y}{2\pi}\sum_{m_x=-M_{k_x}}^{M_{k_x}}\sum_{m_y=-M_{k_y}}^{M_{k_y}}\left(k_{x,m_x}^2\left(\frac{\sin\left(\frac{k_{x,m_x}\Delta x}{2}\right)}{\frac{k_{x,m_x}\Delta x}{2}}\right)^2 + k_{y,m_y}^2\left(\frac{\sin\left(\frac{k_{y,m_y}\Delta y}{2}\right)}{\frac{k_{y,m_y}\Delta y}{2}}\right)^2\right)^{-1} \\
& \times\tilde{\omega}(x_{n_x}, y_{n_y})e^{-\mathrm{i}(k_{x,m_x}x_{n_x} + k_{y,m_y}y_{n_y})} & (36)
\end{aligned}$$

となる。$\Delta x, \Delta y \to 0$ の極限で右辺 $(\cdot)^{-1}$ は $(k_{x,m_x}^2 + k_{y,m_y}^2)^{-1}$ となる。

2.1　境界条件の取扱い

ある領域 $I=[0,L]$ で同次の固定境界条件をみたす連続な関数 $f(x)$ を考える。境界条件を考慮すると $f(x)$ は sin 級数に展開できる。

$$f(x)=\sum_{m=1}^{\infty}\tilde{f}(k_m)\sin k_m x, \qquad \left[f(x_n)=\sum_{m=1}^{M}\tilde{f}(k_m)\sin k_m x_n\right] \tag{37}$$

$$\tilde{f}(k_m)=\frac{2}{L}\int_0^L f(x)\sin k_m x\mathrm{d}x, \qquad \left[\tilde{f}(k_m)=\frac{2}{N}\sum_{n=1}^{N}f(x_n)\sin k_m x_n\right] \tag{38}$$

ここで $k_m=m\pi/L$ $[x_n=n\pi/K]$。一方、$L<x<2L$ で $f(x)=-f(2L-x)$ として領域を $I'=[0,2L]$ に拡張し、さらに $2L$ 周期関数として $[-\infty,\infty]$ に拡張した関数を $f'(x)$ とする。f' は連続なので、$f'(0)=f'(L)=0$ であることが期待できる。f' の Fourier 級数展開は

$$f'(x)=\sum_{m=-\infty}^{\infty}\tilde{f}'(k_m)e^{\mathrm{i}k_m x}, \qquad \left[f'(x_n)=\sum_{m=-M}^{M}\tilde{f}'(k_m)e^{\mathrm{i}k_m x_n}\right] \tag{39}$$

$$\tilde{f}'(k_m)=\frac{1}{2L}\int_{-L}^{L}f'(x)e^{-\mathrm{i}k_m x}\mathrm{d}x, \qquad \left[\tilde{f}'(k_m)=\frac{1}{2N}\sum_{-N}^{N}f'(x_n)e^{-\mathrm{i}k_m x_n}\right] \tag{40}$$

となる。ここで、f' の展開では周期を $2L$ に拡張しているため f',$\tilde{f}'$ それぞれ、$2N$, $2M$ 自由度があることに注意。f' が奇関数であることを考慮すると

$$f'(x)=\sum_{m=1}^{\infty}\tilde{f}'(k_m)\sin k_m x, \qquad \left[f'(x_n)=\sum_{m=1}^{M}\tilde{f}'(k_m)\sin k_m x_n\right] \tag{41}$$

$$\tilde{f}'(k_m)=\frac{2}{L}\int_0^L f'(x)\sin k_m x\mathrm{d}x., \qquad \left[\tilde{f}'(k_m)=\frac{2}{N}\sum_{n=1}^{N}f'(x_n)\sin k_m x_n\right]. \tag{42}$$

すなわち、境界条件を満たすように $f(x)$ を sin 級数で展開することと、$f(x)$ を $f'(x)$ に拡張し exp で展開することは同値である。

同次 Neumann 型境界条件を満たす関数 $g(x)$ は cos 級数に展開でき、$g(x)=g(2L-x)$ として拡張すればよい。