6章 Poisson方程式の高速解法

長方形領域$D=[0,a]\times[0,b]$上の2次元Poisson方程式のDirichlet型境界値問題

$$\begin{cases} u_{xx}(x,y)+u_{yy}(x,y)=f(x,y) & ,(x,y)\in D, \\ u(x,y)=g(x,y) & ,(x,y)\in \partial D. \end{cases} \tag{1.1}$$

の数値解法を考える.

6．1 離散化

・x方向$m+1$等分，y方向$n+1$等分．$m+1,n+1$は2の巾乗とする.

$$\begin{aligned} x_i &= i\Delta x \ \ (0\le i\le m+1), \Delta x=\frac{a}{m+1}, \\ y_j &= j\Delta y \ \ (0\le j\le n+1), \Delta y=\frac{b}{n+1}. \end{aligned} \tag{1.2}$$

・格子点(x_i,y_j)上のuの近似値： $u_{ij}\cong u(x_i,y_j)$ $(0\le i\le m+1, 0\le j\le n+1)$

このうち，未知数は，内点での値u_{ij} $(1\le i\le m, 1\le j\le n)$の$mn$個．境界点での値

$$\begin{aligned} & u_{0,j}=g(0,y_j),\ u_{m+1,j}=g(a,y_j)\ \ (0\le j\le n+1), \\ & u_{i,0}=g(x_i,0),\ u_{i,n+1}=g(x_i,b)\ \ (0\le i\le m+1) \end{aligned} \tag{1.3}$$

は，境界条件より既知.

・偏微係数の中心差分近似

$$\begin{aligned} u_{xx}(x_i,y_j) &\cong u_{ij}^{(x)}=\frac{u_{i-1,j}-2u_{ij}+u_{i+1,j}}{\Delta x^2}, \\ u_{yy}(x_i,y_j) &\cong u_{ij}^{(y)}=\frac{u_{i,j-1}-2u_{ij}+u_{i,j+1}}{\Delta y^2}\ \ (1\le i\le m, 1\le j\le n). \end{aligned} \tag{1.4}$$

◎Poisson方程式の中心差分近似

・5点差分近似

$$u_{ij}^{(x)}+u_{ij}^{(y)}=\frac{u_{i-1,j}-2u_{ij}+u_{i+1,j}}{\Delta x^2}+\frac{u_{i,j-1}-2u_{ij}+u_{i,j+1}}{\Delta y^2}=f_{ij}=f(x_i,y_j) \quad (1\le i\le m, 1\le j\le n), \tag{1.5}$$

◎ 行列方程式による表現

内点における各量を要素にした行列とその列ベクトル・行ベクトル表示を,

$$\begin{aligned} U &= \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ u_{21} & u_{22} & \cdots & u_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ u_{m1} & u_{m2} & \cdots & u_{mn} \end{pmatrix} = (\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2,\cdots,\boldsymbol{u}_n) = \begin{pmatrix} \boldsymbol{v}_1 \\ \boldsymbol{v}_2 \\ \vdots \\ \boldsymbol{v}_m \end{pmatrix}, \\ \boldsymbol{u}_j &= \begin{pmatrix} u_{1j} \\ u_{2j} \\ \vdots \\ u_{mj} \end{pmatrix}\ (1\le j\le n)\ \ ,\boldsymbol{v}_i=(u_{i1},u_{i2},\cdots,u_{in})\ \ (1\le i\le m), \end{aligned} \tag{1.6}$$

$$U^{(x)}=\begin{pmatrix} u_{11}^{(x)} & u_{11}^{(x)} & \cdots & u_{11}^{(x)} \\ u_{21}^{(x)} & u_{22}^{(x)} & \cdots & u_{2n}^{(x)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ u_{m1}^{(x)} & u_{m2}^{(x)} & \cdots & u_{mn}^{(x)} \end{pmatrix}=(\boldsymbol{u}_1^{(x)},\boldsymbol{u}_2^{(x)},\cdots,\boldsymbol{u}_n^{(x)}),\quad \boldsymbol{u}_j^{(x)}=\begin{pmatrix} u_{1j}^{(x)} \\ u_{2j}^{(x)} \\ \vdots \\ u_{mj}^{(x)} \end{pmatrix},\ (1\le j\le n), \tag{1.7}$$

$$U^{(y)}=\begin{pmatrix} u_{11}^{(y)} & u_{11}^{(y)} & \cdots & u_{11}^{(y)} \\ u_{21}^{(y)} & u_{22}^{(y)} & \cdots & u_{2n}^{(y)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ u_{m1}^{(y)} & u_{m2}^{(y)} & \cdots & u_{mn}^{(y)} \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} \boldsymbol{v}_1^{(y)} \\ \boldsymbol{v}_2^{(y)} \\ \vdots \\ \boldsymbol{v}_n^{(y)} \end{pmatrix},\ \boldsymbol{v}_i^{(y)}=(u_{i1}^{(y)},u_{i2}^{(y)},\cdots,u_{in}^{(y)})\quad (1\le i\le m), \tag{1.8}$$

$$F=\begin{pmatrix} f_{11} & f_{12} & \cdots & f_{1n} \\ f_{21} & f_{22} & \cdots & f_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ f_{m1} & f_{m2} & \cdots & f_{mn} \end{pmatrix} \tag{1.9}$$

とする．式(1.5)より，

$$U^{(x)}+U^{(y)}=F \tag{1.10}$$

である．

式(1.4)第1式をベクトル表示して，

$$\boldsymbol{u}_j^{(x)}=\begin{pmatrix} u_{1j}^{(x)} \\ \vdots \\ u_{mj}^{(x)} \end{pmatrix}=\alpha T_m\begin{pmatrix} u_{1j} \\ \vdots \\ u_{mj} \end{pmatrix}+\alpha\begin{pmatrix} u_{0j} \\ \boldsymbol{0} \\ u_{m+1,j} \end{pmatrix}=\alpha T_m\boldsymbol{u}_j+\alpha\boldsymbol{c}_j^{(x)}\ \ (1\le j\le n),\ \alpha=\frac{1}{\Delta x^2}. \tag{1.11}$$

ここで，

$$T_m=\begin{pmatrix} -2 & 1 & & O \\ 1 & -2 & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & 1 \\ O & & 1 & -2 \end{pmatrix}\in\mathbb{R}^{m\times m}. \tag{1.12}$$

ゆえに，

$$\begin{aligned} &U^{(x)}=\alpha T_m U+\alpha C^{(x)}, \\ &C^{(x)}=(\boldsymbol{c}_1^{(x)},\boldsymbol{c}_2^{(x)},\cdots\boldsymbol{c}_n^{(x)})=\begin{pmatrix} u_{01} & u_{02} & \cdots & u_{0n} \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \\ u_{m+1,1} & u_{m+1,2} & \cdots & u_{m+1,n} \end{pmatrix}. \end{aligned} \tag{1.13}$$

つぎに，式(1.4)第2式をベクトル表示して，

$$\begin{aligned} &\left(\boldsymbol{v}_i^{(y)}\right)^{\mathrm{T}}=\begin{pmatrix} u_{i1}^{(y)} \\ \vdots \\ u_{in}^{(y)} \end{pmatrix}=\beta T_n\begin{pmatrix} u_{i1} \\ \vdots \\ u_{in} \end{pmatrix}+\beta\begin{pmatrix} u_{i0} \\ \boldsymbol{0} \\ u_{i,n+1} \end{pmatrix}=\beta T_n\boldsymbol{v}_i^{\mathrm{T}}+\beta\left(\boldsymbol{c}_i^{(y)}\right)^{\mathrm{T}}\ (1\le i\le m),\ \beta=\frac{1}{\Delta y^2}, \\ &\boldsymbol{c}_i^{(y)}=(u_{i0},\boldsymbol{0}^{\mathrm{T}},c_{i,n+1})\in\mathbb{R}^n. \end{aligned} \tag{1.14}$$

すなわち，

$$\boldsymbol{v}_i^{(y)}=\beta\boldsymbol{v}_iT_n+\beta\boldsymbol{c}_i^{(y)}\ \ (1\le i\le m). \tag{1.15}$$

両辺を行ベクトルとする行列を考えると，

$$U^{(y)}=\beta UT_n+\beta C^{(x)},\quad C^{(y)}=\begin{pmatrix} \boldsymbol{c}_1^{(y)} \\ \boldsymbol{c}_2^{(y)} \\ \\ \boldsymbol{c}_m^{(y)} \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} u_{10} & 0 & \cdots & 0 & u_{1,n+1} \\ u_{20} & 0 & \cdots & 0 & u_{2,n+1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ u_{m0} & 0 & \cdots & 0 & u_{m,n+1} \end{pmatrix}. \tag{1.16}$$

式(1.13), (1.16)を式(1.10)に代入して，未知行列Uに関する行列方程式

$$\alpha T_m U+\beta UT_n=B,\quad B=F-\alpha C^{(x)}-\beta C^{(y)} \tag{1.17}$$

を得る．

６．２　行列T_nの固有値解析

加法定理より，

$$\sin\frac{(k-1)l\pi}{n+1}+\sin\frac{(k+1)l\pi}{n+1}=2\cos\frac{l\pi}{n+1}\sin\frac{kl\pi}{n+1}\quad (1\le k\le n, 1\le l\le n). \tag{2.1}$$

ここで,

$$s_{kl}=\sin\frac{kl\pi}{n+1},\ c_l=2\cos\frac{l\pi}{n+1} \tag{2.2}$$

とおけば， $s_{0l}=s_{n+1,l}=0$ であるから，

$$\begin{cases} s_{2l} = c_l s_{1l}, \\ s_{k-1,l}+s_{k+1,l}=c_l s_{kl} \quad (2\le k\le n-1), \\ s_{n-1,l}=c_l s_{n,l}. \end{cases}$$

これを行列表示して,

$$B_n\boldsymbol{s}_l=\begin{pmatrix} 0 & 1 & & O \\ 1 & 0 & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & 1 \\ O & & 1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} s_{1l} \\ s_{2l} \\ \vdots \\ s_{n,l} \end{pmatrix}=c_l\begin{pmatrix} s_{1l} \\ s_{2l} \\ \vdots \\ s_{n,l} \end{pmatrix}=c_l\boldsymbol{s}_l\quad (1\le k\le n). \tag{2.3}$$

ゆえに， $c_l, \boldsymbol{s}_l$ $(1\le l\le n)$ はB_nの固有値と固有ベクトルである．ここで,

$$S_n=(\boldsymbol{s}_1,\boldsymbol{s}_2,\cdots,\boldsymbol{s}_n),\ C_n=\mathrm{diag}(c_1,c_2,\cdots,c_n) \tag{2.4}$$

とおけば,

$$B_n=S_nC_nS_n^{-1} \tag{2.5}$$

である．$T_n=-2I_n+B_n$ゆえ， $d_l^{(n)}=-2+c_l, \boldsymbol{s}_l$ $(1\le l\le n)$ がその固有値と固有ベクトルで,

$$T_n=S_nD_nS_n^{-1},\quad D_n=\mathrm{diag}(d_1^{(n)},d_2^{(n)},\cdots,d_n^{(n)}),\ d_l^{(n)}=-2\left(1-\cos\frac{l\pi}{n+1}\right)=-4\sin^2\frac{l\pi}{2(n+1)}\quad (1\le l\le n) \tag{2.6}$$

となる．変換$\boldsymbol{y}=S_n\boldsymbol{x}$は,

$$y_l = \sum_{k=1}^{n} x_k \sin\frac{\pi kl}{n+1} \quad (1 \le l \le n) \tag{2.7}$$

ゆえ，離散型sine逆変換である．変換 $\boldsymbol{y} = S_n{}^{-1}\boldsymbol{x}$ は

$$y_l = \frac{2}{n+1}\sum_{k=1}^{n} x_k \sin\frac{\pi kl}{n+1} \quad (1 \le l \le n) \tag{2.8}$$

であり，離散型sine変換である．これらは，$n+1 = 2^m$ のとき，Cooley-TukeyのFFTにより，$n\log_2 n + O(n)$ の乗算数で計算できる．

Mathematicaには，離散型sine変換関数FourierDSTが用意されている．仕様は入力

$$x = \{x_1, x_2, \cdots, x_n\}$$

に対して，

$$y = \text{FourierDST}[x,1] = \{y_1, y_2, \cdots, y_n\}, \quad y_l = \sqrt{\frac{2}{n+1}}\sum_{k=1}^{n} x_k \sin\frac{\pi kl}{n+1} \quad (1 \le l \le n) \tag{2.9}$$

である．この線形変換を

$$\boldsymbol{y} = (y_1, y_2, \cdots, y_n)^{\mathrm{T}} = \tilde{S}_n \boldsymbol{x}, \quad \boldsymbol{x} = (x_1, x_2, \cdots, x_n)^{\mathrm{T}} \tag{2.10}$$

と書くと，(2.7), (2.8)より，

$$S_n = \sqrt{\frac{n+1}{2}}\tilde{S}_n, \quad S_n{}^{-1} = \sqrt{\frac{2}{n+1}}\tilde{S}_n \tag{2.11}$$

である．よって，式(2.6)より，

$$T_n = \tilde{S}_n D_n \tilde{S}_n \tag{2.12}$$

である．また，(2.11)の両式を片々掛けて，

$$\tilde{S}_n{}^2 = I_n \tag{2.13}$$

である．

6．3　Poisson方程式の高速解法

式(1.17)に式(2.12)から，$T_m = \tilde{S}_m D_m \tilde{S}_m$，$T_n = \tilde{S}_n D_n \tilde{S}_n$ を代入して，

$$\alpha \tilde{S}_m D_m \tilde{S}_m U + \beta U \tilde{S}_n D_n \tilde{S}_n = B. \tag{3.1}$$

両辺に左から $\tilde{S}_m$，右から $\tilde{S}_n$ を掛けて，(2.13)を用いると，

$$\alpha D_m \tilde{S}_m U \tilde{S}_n + \beta \tilde{S}_m U \tilde{S}_n D_n = \tilde{S}_m B \tilde{S}_n \tag{3.2}$$

となる．ここで，

$$V = \tilde{S}_m U \tilde{S}_n = (v_{ij}),\ A = \tilde{S}_m B \tilde{S}_n = (a_{ij}) \tag{3.3}$$

と置くと，

$$\alpha D_m V + \beta V D_n = A. \tag{3.4}$$

これを要素ごとに書けば，

$$\alpha d_i^{(m)} v_{ij} + \beta v_{ij} d_j^{(n)} = a_{ij}.$$

すなわち，

$$v_{ij} = \frac{a_{ij}}{\alpha d_i^{(m)} + \beta d_j^{(n)}} \quad (1 \le i \le m, 1 \le j \le n) \tag{3.5}$$

である．これより，(3.3)第1式の両辺に左から$\tilde{S}_m$，右から$\tilde{S}_n$を掛けて得られる

$$U = \tilde{S}_m V \tilde{S}_n \tag{3.6}$$

で，Uが計算できる．

以上をまとめて，次のアルゴリズムを得る．

＜アルゴリズム＞：高速Poisson Solver

(1) 式(1.17)の行列Bを作る．

(2) 式(3.3)の行列Aを高速sine変換により計算．

(3) 式(3.5)により行列Vを計算．

(4) 式(3.6)の解行列Uを高速sine変換により計算．

◎計算量

(2) $m \times n$行列に左から$\tilde{S}_m$を掛ける：$O(n \times m \log_2 m)$ *flops*

$m \times n$行列に右から$\tilde{S}_n$を掛ける：$O(m \times n \log_2 n)$ *flops*

(3) $O(mn)$ *flops*

(4) 2と同じ

合計　$O(mn \log_2 mn)$ *flops*

◎他の方法との比較

(1.17)をUの要素u_{ij} $(1 \le i \le m, 1 \le j \le n)$に関する$mn$変数線形方程式と見なす．

１．Gauss消去法：$\frac{1}{3} m^3 n^3 + O(m^2 n^2)$ *flops*．

２．係数行列が粗行列であることを利用したGauss消去法：$O(mn \min\{m^2, n^2\})$ *flops*

３．反復解法（k回反復）：$O(kmn)$ *flops*

反復回数$k = O(\log_2 mn)$程度の，効率の良い反復解法のみが，我々の方法に匹敵する．