

代用電荷法における数学的問題について

東大 教養学部 岡本 久

§ 1. 序. 代用電荷法は, 数学に対し, 多くの問題を提供している。ここでは, いくつかの数学的問題について述べ, どこが困難なのか, 指摘したい。簡単のため, 調和関数に話を限ることにするが, 代用電荷法自体は, もう少し広い問題にも適用できるものである。

\mathbb{R}^2 もしくは \mathbb{R}^3 内の有界領域を Ω とする。 Ω で, 次の境界問題を考える。

$$\begin{cases} \Delta u = 0 & \text{in } \Omega \\ u = f & \text{on } \partial\Omega \end{cases}$$

ここで, f は, 境界 $\partial\Omega$ 上で与えられた連続関数とする。

いわゆる Trefftz の方法は, Ω で $\Delta\psi_j = 0$ を満たす ψ_j ($j=1, 2, \dots, N$) を取り, u の近似 u_N を $u_N(x) = \sum_{j=1}^N \alpha_j \psi_j(x)$ という ψ_j の線型結合で表わし, 実係数 $\alpha_1,$

\dots, α_N を, u_N が, $\partial\Omega$ 上で近似的に f に等しくなるように定めるものである。 α_j の定め方として最もよく用いられる方法は, $\partial\Omega$ 上に N 個の点 x_1, \dots, x_N をとり,

$$\sum_{j=1}^N \alpha_j \psi_j(x_k) = f(x_k) \quad (k=1, 2, \dots, N)$$

で α_j を定める方法である。これは, 選点法と呼ばれる。この方法において, ψ_j として, 特に,

$$\psi_j(x) = E(x - y_j)$$

という形のものをとったのが代用電荷法である。ここで, $E(z)$ は $-\Delta$ に対する基本解であり, y_j は Ω の外部の点である。 E は,

$$E(z) = \begin{cases} -\frac{1}{2\pi} \log|z| & (2 \text{次元}) \\ \frac{1}{4\pi} \frac{1}{|z|} & (3 \text{次元}) \end{cases}$$

であるので特異点を持つが, y_j は Ω の外部の点であるので, $E(x - y_j)$ は $\overline{\Omega}$ で C^∞ かつ調和であることを注意しておく。結局, 代用電荷法のアルゴリズムとは, 次のようなものである。

アルゴリズム $\partial\Omega$ 上の N 個の点 x_1, \dots, x_N と Ω の外部の点 y_1, \dots, y_N をとり, $\alpha_1, \dots, \alpha_N$ を,

$$(1) \quad A \vec{\alpha} = \vec{f}$$

で定め、 $u_N(x) = \sum_{j=1}^N E(x-y_j) \alpha_j$ を近似解として採用する。ここで、

$$\vec{\alpha} = \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \vdots \\ \alpha_N \end{pmatrix}, \quad \vec{f} = \begin{pmatrix} f(x_1) \\ \vdots \\ f(x_N) \end{pmatrix}, \quad A = \begin{pmatrix} E(x_i - y_j) \\ \vdots \\ E(x_i - y_j) \end{pmatrix}_{\substack{1 \leq i, \\ j \leq N}}$$

である。

アイデア、アルゴリズムともに簡単であり、連立方程式(1)を解くだけであるので、プログラミングも簡単である。にもかかわらず、この方法で与えられる近似解は、ある場合には、驚く程の高精度のものであることがある。有効数字6桁まで正しい近似解が容易に出ることもしばしばである。しかし、このアルゴリズムにはよくわかっていない点が多い。いくつかの問題点をあげてみよう。

① 近似解 $u_N(x)$ 自体は、 $\bar{\Omega}$ の近傍で C^∞ である。従って、 u_N が u の良い近似であるとするれば、境界値 $h(x)$ 自身も滑らかである必要があるだろう。逆に言えば、滑らかな f については良い近似を与えても、滑らかさがあまりない場合には、近似解の精度は悪いであろう。

② $A\vec{\alpha} = \vec{f}$ を解く際に、 A は密行であるので、消去法を用いるしかない。このとき、 A の条件数が極めて大きいことが、代用電荷法の特徴である。その条件数は、境界要素法に現われる行列と比べても、はるかに大きい。

③ $\{x_j\}$ や $\{y_j\}$ の選ぶ方によって近似の精度が大きく違ってくる。ところが、これらの点をどう選んだら良いのか、確固たる原理はない。数値実験に基づいて、色々な方法が提出されているが、数学的な根拠となるとよくわからない。

これら以外にも、原理的な諸問題で、明らかにされていないものも多い。

§ 2. 可解性, 収束性。 次のような問題を考えよう。

問題 1. $\det A \neq 0$ なる条件は何か?

問題 2. $\det A = 0$ として、 $u(x) - u_N(x)$ を、 N と f で評価できるか? それは、どの程度小さいのか?

問題 3. どのような $\{x_j\}, \{y_j\}$ が誤差を小さくするのか?

いづれもよくわかっていないが、文献 [3, 4] の例が、ひとつの手がかりを与えてくれる。ここでは、 Ω が半径 ρ の、2次元円板である場合を考えている。この場合は、 $\{x_j\}$ は円周上に等間隔にとるのが自然であり、 $\{y_j\}$ も、やはり、同心円周上に、等間隔にとるべきであろう。そこで、 R を ρ より大きい数として、複素表示で、

$$y_j = R \exp\left(\frac{2\pi\sqrt{-1}(j-1)}{N} + \sqrt{-1}\theta_0\right),$$

$$x_j = \rho \exp\left(\frac{2\pi\sqrt{-1}(j-1)}{N}\right)$$

ととる (右図)。

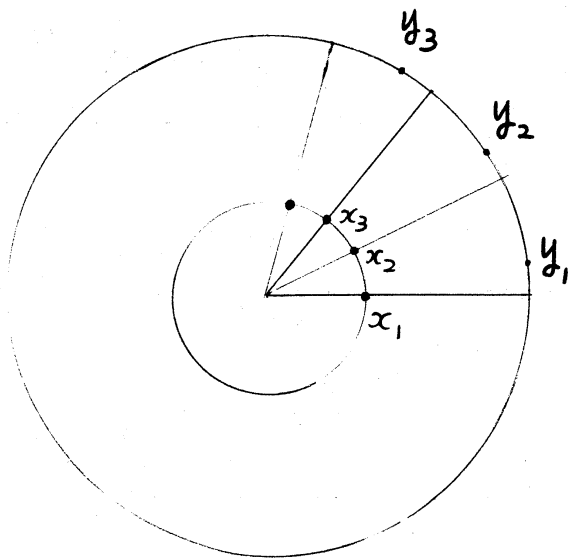
ここで、 $\theta_0 \in [0, \frac{2\pi}{N})$

は定数である。

文献 [1] では、 $\theta_0 = 0$ のときを、

対向形配置、 $\theta_0 = \pi/N$ のときを、

千鳥形配置と呼んでいる。以上のような状況のもとでは、数学的な解析ができる。次に述べる定理 1 によって、千鳥形配置以外の場合には、節点の数が十分大きければ、(1) は可解であることがわかる。



定理 1. ([3, 4])

(ア) $\theta_0 = 0$ のとき,

$$\det A \neq 0 \iff R^N - \rho^N \neq 1$$

(イ) $\theta_0 \neq \frac{\pi}{N}$ のとき, $N \gg 1 \implies \det A \neq 0$

(ロ) $\theta_0 = \frac{\pi}{N}$ のとき,

$$N \text{ が偶数} \implies \det A = 0$$

$$N \text{ が奇数} \implies \text{十分大きい } N \text{ について } \det A \neq 0$$

定理 2 ([3]) f が実解析的ならば, $\exists a \in (0, 1)$

$$\|u - u_N\|_{L^\infty(\Omega)} = O(a^N) \quad (N \rightarrow +\infty)$$

これによつて, 実解析的関数に対しては, 誤差が指数的に減少することを示している。これは, “条件の良い場合には, 代用電荷法の解は極めて精度が高い” という数値的事実を裏付けるものとなっている。 f が, もっと弱く, Sobolev 空間 $H^l(S')$ には入っているというだけの場合にも収束は保証されるが, これについては [4] 参照。

このように、誤差の指数減少という、差分法や有限要素法には見られない良い性質が存在することは、注目に値するであろう。しかし、一般の領域では、どのような $\{x_j\}$, $\{y_j\}$ をとったらよいのかは不明である。この点で、天野氏らの豊富な実験例 [5, 6] と、四ッ谷氏らの研究 [2] は注目に値するものである。こうした事実の背後にどのような数学的原理が存在するのが、よくわかっていない。3次元領域の場合は、厳密に解析できる例すらわかっていないようである。

§3. 最良配置

問題3は、極めて重要な問題でありながら、ほとんど何もわかっていない状況のようである。ひとつの方向として、Mathon et al. [7] による次のようなアルゴリズムがある：
 $\{x_j\}$ と $\{y_j\}$ が与えられたものとする、 u_N が定まるから、

$$(2) \quad e(x_1, x_2, \dots, x_N, y_1, y_2, \dots, y_N) \equiv \|u - u_N\|$$

という関数を考える。右辺の $\|\cdot\|$ は何らかのノルム、例えば L^∞ -ノルムとする。彼らのやり方は、

$$(3) \quad \min e(x_1, \dots, x_N, y_1, \dots, y_N)$$

を達成するような $x_1, \dots, x_N, y_1, \dots, y_N$ を求めれば良いという
 ことである。しかしながら、この方法は、少なくとも数学
 的には、魅力に乏しい。何故ならば、簡単な線型の方程式を
 解くために、複雑な非線型の最小化問題を解くのでは割に合
 わないように思われるからである。しかも、ひとつの f が与
 えられたとき、最良の $\{x_j\}, \{y_j\}$ が求められたとしても、こ
 の $\{x_j\}, \{y_j\}$ は、別の f' に対しては、良い配置である保証
 は何もないのである。この点を考慮に入れて、Mathon et al.
 のアルゴリズムを次のように変更すると、もう少し一般的な
 定式化が得られる。

$$(4) \quad \min_{\|f\| \leq 1} \sup \frac{e(x_1, \dots, x_N, y_1, \dots, y_N)}{\|f\|} .$$

すなわち、誤差を最小にするのではなく、誤差を与える汎関
 数のノルムを最小化するわけである。数学的には、こちらの
 方が扱い易そうであるが、(4)を計算機で実行するのは容易で
 はない。そこで、別のアルゴリズムを提唱したいと思う。

このため、誤差関数の定義を行なう。以後、次元は2で
 あるとする。

定義 $x_1, \dots, x_N \in \partial\Omega$, $y_1, \dots, y_N \in \mathbb{R}^2 \setminus \bar{\Omega}$ が与えられたとき, $(Q_{ij})_{1 \leq i, j \leq N}$ を A の逆行列とする。このとき,

$$(5) \quad \Phi^{(N)}(z, \zeta) = \frac{1}{\zeta - z} - \sum_{j, \vartheta=1}^N Q_{j, \vartheta} \log|z - y_j| \frac{1}{\zeta - x_{\vartheta}}$$

を誤差関数と呼ぶことにする。こう呼ぶのは, 次の事実 ([3]) による。

$$u(z) - u_N(z) = \operatorname{Re} \left[\frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} \Phi^{(N)}(z, \zeta) F(\zeta) d\zeta \right]$$

for all $z \in \Omega \subset \mathbb{C}$.

但し, u は $\bar{\Omega}$ を含む開集合 D で正則な関数 $F(\zeta)$ によって $u(\zeta) = \operatorname{Re}[F(\zeta)]$ と表わされるものと仮定する。 Γ は, D 内の閉曲線で, $\bar{\Omega}$ を内側に含むものとする。この公式によって,

$$\|u - u_N\|_{L^\infty(\Omega)} \leq \frac{1}{2\pi} \sup_{x \in \partial\Omega} \int_{\Gamma} |\Phi^{(N)}(x, \zeta)| |d\zeta| \cdot \|F\|_{L^\infty(\Gamma)}$$

を得る。

従って、次式を得る。

$$(6) \quad \frac{\|u - u_N\|_{L^\infty(\Omega)}}{\|F\|_{L^\infty(\Gamma)}} \leq \frac{1}{2\pi} \sup_{x \in \partial\Omega} \int_{\Gamma} |\Phi^{(N)}(x, \zeta)| |d\zeta|$$

これによつて、アルゴリズム (4) の代わりに、

$$(7) \quad \min_{\{x_j\}, \{y_j\}} \sup_{x \in \partial\Omega} \int_{\Gamma} |\Phi^{(N)}(x, \zeta)| |d\zeta|$$

を考える。このアルゴリズムの解と、(4) のアルゴリズムの解とは、直接の関係はないが、(6) を見れば、(7) の解は、解析的な u については最良配置に近い働きをすることが期待される。(7) を解くのは、(4) に比べればやさしい。

§ 4. 放物型方程式に対する代用電荷法.

村島 [1] には、様々の興味ある事実が書かれており、数学的な問題を、多く提出している。その中のひとつに、熱方程式を、代用電荷法のアイデアで解く方法がある。

一次元区間上の熱方程式の Dirichlet 問題を考える。

$$\begin{cases} u_t = u_{xx} & (0 < t, 0 < x < 1) \\ u(0, x) = u_0(x) \\ u(t, 0) = u(t, 1) = 0 \end{cases}$$

パラメータ $\alpha > 0$ を与えて, 次のような近似関数を考える。

$$u_\alpha(t, x) = \int_0^1 E(t, x-y) u_0(y) dy + \int_0^t E(t-s, x+\alpha) \varphi_0(s) ds - \int_0^t E(t-s, x-1-\alpha) \varphi_1(s) ds$$

$$(0 \leq x \leq 1).$$

ここで, φ_0, φ_1 は未知関数で, $E(t, x) = \frac{1}{\sqrt{4\pi t}} \exp\left(-\frac{x^2}{4t}\right)$ は基本解である。この u_α は, 熱方程式と初期条件を厳密に満たす。そこで, φ_0 と φ_1 を, 境界条件が, 近似的に満たされるように決めればよい。このために, 再び選点法を採用することにする。 $\tau > 0$ を固定し, $\varphi_0(s), \varphi_1(s)$ は各 $[n\tau, (n+1)\tau)$ ($n=0, 1, \dots$) で一定の値をとるものとする。従って $\{\varphi_0(n\tau)\}$ さえ決めればよい。 $\beta_n = \varphi_0((n-1)\tau)$, $\gamma_n = \varphi_1((n-1)\tau)$ ($n=1, \dots$) とおく。

$$u_\alpha(\tau, 0) = u_\alpha(\tau, 1) = 0 \text{ より,}$$

$$\int_0^1 E(\tau, -y) u_0(y) dy + \beta_1 \int_0^\tau E(\tau-s, \alpha) ds - \gamma_1 \int_0^\tau E(\tau-s, -1-\alpha) ds = 0,$$

$$\int_0^1 E(\tau, 1-y) u_0(y) dy + \beta_1 \int_0^\tau E(\tau-s, 1+\alpha) ds - \gamma_1 \int_0^\tau E(\tau-s, -\alpha) ds = 0.$$

$n \in \mathbb{N}$ (ただし $\tau u_\alpha(n\tau, 0) = u_\alpha(n\tau, 1) = 0$ とし),

$$\int_0^1 E(n\tau, -y) u_0(y) dy + \sum_{j=1}^n \beta_j \int_{(j-1)\tau}^{j\tau} E(n\tau-s, \alpha) ds - \sum_{j=1}^n \gamma_j \int_{(j-1)\tau}^{j\tau} E(n\tau-s, 1+\alpha) ds = 0,$$

$$\int_0^1 E(n\tau, 1-y) u_0(y) dy + \sum_{j=1}^n \beta_j \int_{(j-1)\tau}^{j\tau} E(n\tau-s, 1+\alpha) ds - \sum_{j=1}^n \gamma_j \int_{(j-1)\tau}^{j\tau} E(n\tau-s, -\alpha) ds = 0.$$

そこで、数列 $\{a_m\}$ と $\{b_m\}$ を,

$$a_m = \tau E\left(m\tau + \frac{\tau}{2}, \alpha\right), \quad b_m = \tau E\left(m\tau + \frac{\tau}{2}, 1+\alpha\right)$$

で定義する。これらは、各々、

$$\int_0^{\tau} E((m+1)\tau-s, \alpha) ds, \quad \int_0^{\tau} E((m+1)\tau-s, 1+\alpha) ds$$

を中点公式で近似したものである。こうすると、 $\{\beta_i\}, \{\gamma_j\}$ を決定するための近似式として、

$$\sum_{j=1}^n a_{n-j} \beta_j - \sum_{j=1}^n b_{n-j} \gamma_j = f_n \quad \left(\equiv \int_0^1 E(n\tau, -y) u_0(y) dy \right)$$

$$\sum_{j=1}^n b_{n-j} \beta_j - \sum_{j=1}^n a_{n-j} \gamma_j = g_n \quad \left(\equiv \int_0^1 E(n\tau, 1-y) u_0(y) dy \right)$$

が導かれる。

α と τ が十分小ならば、 $b_m \ll a_m$ であるから、 b_m を無視することにする。こうすると、結局

$$(8) \quad \sum_{j=1}^n a_{n-j} \beta_j = f_n \quad (n=1, 2, \dots)$$

という形の漸化式を解けばよいことになる。(8) が安定に解けるかどうか考えてみよう。 $\{\varepsilon_n\}_{n=1}^{\infty}$ が、

$$(9) \quad a_0 \varepsilon_n + a_1 \varepsilon_{n-1} + \dots + a_{n-1} \varepsilon_1 = 0$$

に従って決まる時、 $|\varepsilon_n| \leq c|\varepsilon_1|$ ($\forall n$) なる定数があれば安定、そうでないとき不安定ということにする。(9)は線型だから、 $\varepsilon_1 = 1$ として一般性を失わない。 a を、 $a = \frac{\alpha^2}{2\tau}$ で定義すると、

$$a_m = \sqrt{\frac{\tau}{2\pi}} \frac{1}{\sqrt{2m+1}} e^{-\frac{a}{2m+1}}$$

となるので、(9)の安定性は a の値だけで決まる。数値計算によると、 $a < 1.90117$ のとき、 $\{\varepsilon_n\}$ は、有界数列、すなわち、(9)は安定となり、 $a > 1.90118$ のときには不安定となる。この数値の意味が何なのかは、筆者にはわからない。また、次のようなことが、数値実験によってわかる：

$a < 0.463$ のとき、 $\varepsilon_2, \varepsilon_3, \dots$ は負で、単調に増大しながら 0 に近づく。一方、 a が、1.90117 に近いと、 $\{\varepsilon_n\}$ は、はじめの数項をのぞけば、

$$2.156\dots, -2.156\dots, +2.156\dots, -2.156\dots$$

とふるまい、これが相当長く続いた後、 $a < 1.90117$ ならば次第に絶対値は減少してゆき、 $a > 1.90118$ なら増大してゆくようになる。しかしながら、(9)自体は、どのような a に対しても、周期 2 の数列を解には持たない。こういったことをうまく説明することは、今の所、筆者には

できない。

文献

- [1] 村島定行：代用電荷法とその応用， 森北出版(1983年)
- [2] 山本, 大坪, 贅田, 四ッ谷： 代用電荷法における仮想電荷の機械的配置について， 宮崎大学工学部研究報告 第34号
1988年， 6月， 73-77.
- [3] M. Katsurada and H. Okamoto: A mathematical study of the charge simulation method I, J. Fac. Sci. Univ. Tokyo, Sec. IA, vol 35 (1988) 507-518.
- [4] M. Katsurada: —— II, *ibid.*, vol. 36 (1989) 135-162.
- [5] 天野 要： 代用電荷法に基づく等角写像の数値計算法， 情報処理学会論文誌， 第28巻 7号， 昭和62年 7月， 697-704
- [6] 天野, 高松, 安部： 代用電荷法とNewton法による逆等角写像の数値計算法， 同上 第30巻 4号，
平成元年， 411-418

- [7] R. Mathon and R.J. Johnston: The approximate solution of elliptic boundary-value problems by fundamental solutions, SIAM J. Numer. Anal. 14 (1977) 638-650