

代用電荷法のプログラム

明大理工 桂田 祐史 M. Katsurada

1 この研究の目標

代用電荷法 (charge simulation method¹) は主に Laplace 方程式等の境界値問題を近似的に解くためのアルゴリズムである。Laplace 方程式を解くために使えるアルゴリズムは数多く、プログラムを入手することも容易だが、あえて代用電荷法を採用する理由は、この方法が次のような長所を持っているためである。

- 厳密解が十分滑らかならば、少ない手間で高精度の近似解が得られやすい。
- 導関数を精度良く計算しやすい。特に厳密解が十分滑らかならば、境界まで込めて良い近似を与える。

要するに、つねに他の方法より優れているわけではないが、ある種の条件が揃っている場合には、非常に良好な結果を生む、ということである。

代用電荷法を適用するには、電荷点 (charge points)、標本点 (拘束点, collocation points) と呼ばれる点の配置を決定する必要がある。この際に、解こうとしている問題に応じて、適切な配置を見出すことが重要な問題となる。ここでは、既に発表した、等角写像を用いて自動的に電荷点、標本点の配置を決定する代用電荷法のアルゴリズムの実用化、プログラムの開発について考察する。

代用電荷法のプログラミングは元々あまり難しいものではないが、電荷点、標本点の配置まで込めて自動化された、使い勝手の良いプログラムの開発と公開は、各種の応用に際して意義のあることだと考える。

¹fundamental solution method と呼んだ方が通りが良いかも知れない。

Laplace 方程式は基本的で、ある種の非線形問題を解く際にも、反復計算の各段階で現れることがある。実際、講演者が代用電荷法を研究するきっかけとなったのは、岡本-東海林の 2 次元完全流体の自由境界値問題の数値シミュレーションのためのプログラムの中で、Laplace 方程式のソルバーとして、代用電荷法が採用されて好結果を得たことである。その際、電荷点・標本点の配置については、試行錯誤が必要であったという。他にも、色々な問題の数値シミュレーションへの応用 — 部品としての組み込み — が考えられる。それらのシミュレーションに取り組む人の足掛かりとなるプログラムを開発するのが目標である。また色々な問題に応用してもらうことによって、問題点を洗い出しアルゴリズムで改良すべき点を考えたり、他の方法との比較を通して、代用電荷法の守備範囲を明確化する (例えば、こういう問題は境界要素法がよくて代用電荷法を使うべきではない、こういう問題は是非とも代用電荷法を使うべきである等) ことを目指したい。

2 アルゴリズム

ここで考える問題は、次の Laplace 方程式の Dirichlet 問題である。

$$(1) \quad \Delta u = 0 \quad (\text{in } \Omega)$$

$$(2) \quad u = f \quad (\text{on } \Gamma).$$

ただし Ω は平面 \mathbf{R}^2 内の解析的な Jordan 閉曲線 Γ で囲まれた有界領域、 f は Γ 上定義された既知の関数で、 u が求めるべき未知関数である。以下、平面 \mathbf{R}^2 をしばしば \mathbf{C} と同一視して考える。

選点法 (collocation method) にもとづく代用電荷法では、この問題に対する近似解 $u^{(N)}$ を次の手順で構成する:

選点法にもとづく代用電荷法

- (i) Γ 上から点 $\{x_j; j = 1, 2, \dots, N\}$ を選ぶ。
- (ii) Ω の外部から点 $\{y_j; j = 1, 2, \dots, N\}$ を選ぶ。
- (iii) 未知定数 $\{Q_j; j = 1, 2, \dots, N\}$ をうまく取って

$$(3) \quad u^{(N)}(x) = \sum_{j=1}^N Q_j \log |x - y_j|$$

で定まる $u^{(N)}$ が、collocation equation

$$(4) \quad u^{(N)}(x_j) = f(x_j) \quad (j = 1, 2, \dots, N)$$

を満たすようにする。

(iv) $u^{(N)}$ を問題 (1), (2) の近似解とする。

ここで (i) における $\{y_j\}$ (電荷点と呼ばれる), (ii) における $\{x_j\}$ (標本点と呼ばれる) をどう取るかが問題となる。[KO] では次のことが示された:

「単位円周の近傍を Γ の近傍に等角に写す写像 Ψ で、単位円周の像が Γ であるものがあつたとしよう。すなわち

$$(5) \quad \exists \kappa > 1 \quad \text{s.t.} \quad \begin{cases} \Psi: \{x; 1/\kappa \leq |x| \leq \kappa\} \rightarrow \mathbf{C} \quad \text{等角,} \\ \Psi(\{x; |x| = 1\}) = \Gamma \end{cases}$$

このとき $1 < R < \kappa$ なる R を取って、 $N \in \mathbf{N}$ に対して標本点 x_j , 電荷点 y_j を

$$x_j = \Psi(\omega^{j-1}), \quad y_j = \Psi(R\omega^{j-1}) \quad (j = 1, 2, \dots, N),$$

ただし

$$\omega = \exp\left(\frac{2\pi i}{N}\right), \quad i = \sqrt{-1}$$

と選ぶと、代用電荷法が有効に働く。

ここに現れる条件 (5) を満たす Ψ としては、領域 Ω の内部写像関数、外部写像関数などがあるが、それ以外の Ψ も見つけやすい。実際 $\psi: [0, 2\pi] \rightarrow \mathbf{C}$ を Γ の解析的なパラメータづけ、

$$\psi(\theta) = \sum_{n \in \mathbf{Z}} \alpha_n e^{in\theta}$$

をその Fourier 級数展開とすると、

$$\Psi(z) = \sum_{n \in \mathbf{Z}} \alpha_n z^n$$

で定義される Ψ は条件 (5) を満足する。」

ここに記された配置法をまとめておこう。すなわち次の (a)-(f) で電荷点、標本点を決定する。

境界の解析的パラメータづけに基づく配置法

- (a) 境界 Γ の適当な解析的パラメータづけ $\psi: S^1 \rightarrow \mathbf{C}$ を取る。(ここで $S^1 \equiv \mathbf{R}/2\pi\mathbf{Z}$.)
- (b) 適当な $R > 1$ を取る。
- (c) 適当な $N \in \mathbf{N}$ を取る。
- (d) $x_j = \psi(2\pi(j-1)/N)$ ($j = 1, 2, \dots, N$) とおく。
- (e) ψ の Fourier 係数 $\{\alpha_n\}_{n \in \mathbf{Z}}$ を求める。($\alpha_n = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \psi(\theta) e^{-in\theta} d\theta$ である。))
- (f) $y_j = \Psi(R\omega^{j-1})$ ($j = 1, 2, \dots, N$) とおく。ただし $\Psi(z) \equiv \sum_{n \in \mathbf{Z}} \alpha_n z^n$.

実際の数値計算では、大抵の場合、 $\{\alpha_n\}$ や Ψ は FFT を用いて近似計算することになる。具体的には次のような計算手順になる。

配置法 I 上記の配置法の (e), (f) を次の (I-e), (I-f) で置き換える。

(I-e) ψ の Fourier 係数の近似値 $\{\alpha_k; |k| \leq N/2\}$ を $\{x_j; j = 1, 2, \dots, N\}$ の N 項離散 Fourier 変換として求める:

$$\alpha_k = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N x_j \omega^{-k(j-1)}.$$

(I-f) $\{y_j; j = 1, 2, \dots, N\}$ を $\{R^k \alpha_k; |k| \leq N/2\}$ の N 項離散逆 Fourier 変換として求める:

$$y_j = \sum_{|k| \leq N/2} R^k \alpha_k \omega^{k(j-1)}.$$

離散 Fourier 変換の aliasing が気になる場合は、以下のようにすることも考えられる。

配置法 II 配置法 I の (I-d), (I-e) を次の (II-d), (II-e) で置き換える。

(II-d) $x_j = \psi(2\pi(j-1)/N)$, $x_{j+1/2} = \psi(2\pi(j-1/2)/N)$ ($j = 1, 2, \dots, N$) とおく。

(II-e) ψ の Fourier 係数の近似値 $\{\alpha_k; |k| \leq N\}$ を $\{X_j; j = 1, 2, \dots, 2N\}$ ($X_j = x_{(j+1)/2}$) の $2N$ 項離散 Fourier 変換として求める:

$$\alpha_k = \frac{1}{2N} \sum_{j=1}^{2N} X_j \tilde{\omega}^{-k(j-1)}.$$

$$\text{ただし } \tilde{\omega} = \exp\left(\frac{2\pi i}{2N}\right).$$

注意: 事後誤差評価の際に $\{x_{j+1/2}\}$ が必要になることもあるので、最初から $\{x_{j+1/2}\}$ を求めておいて、 ψ の Fourier 係数 $\{\alpha_k\}$ を精度良く求めるのは有効であると思われる。

問題によっては、適当な ψ を陽に求めるのが面倒あるいは困難な場合もあるが、その場合は次のようにすることも考えられる。

配置法 III (a) を省き、(I-d) の代わりに (III-d) を用いる。

(III-d) とにかく何らかの方法で Γ を N 分割する点 $\{x_j; j = 1, 2, \dots, N\}$ を定める。

配置法 IV (a) を省き、(II-d) の代わりに (IV-d) を用いる。

(IV-d) とにかく何らかの方法で Γ を $2N$ 分割する点 $\{x_j, x_{j+1/2}; j = 1, 2, \dots, N\}$ を定める。

配置法 I, II はまだしも、配置法 III, IV ともなると、その正当性は証明できることではなくなるとと思われる。しかし、この配置法を実現したプログラムを用意しておくことは實際上望ましいことであろう。

3 標本点配置, パラメータの選択

前節に述べた配置法は、まったく何の方針もなかった状況からすればかなり前進したものではあるが、本当のアルゴリズムと呼ぶには、まだまだ穴がある。すなわち、以下のものを何らかの仕方で決定しなければならない。

- [1] Γ のパラメータづけ ψ , あるいは「標本点」 $\{x_j\}$, あるいは「 $2N$ 分割点」 $\{x_j, x_{j+1/2}\}$.
- [2] 電荷を Γ からどれだけ離して置くかを定めるパラメータ R .
- [3] 電荷個数 N .

以下これらの問題について、簡単に考察しよう。

- 不確定要素が多いようだが、標本点と電荷点の位置関係が求まっていることは大きい。誤差の挙動についても、ある程度分かっているため、パラメータの最適化 (自動決定) が出来る可能性がある。
- 問題 [1] が一番難しく、多分さらなる研究が必要であると思われる。
 - R については $1 < R < \kappa$ という制限がつき、滑らかなデータの問題に対しては、(collocation equation が悪条件にならないという制限つきで) R が大きい方がよい結果を与えるということから、大きい κ が取れる方が、後の自由度が大きくなって良い、と想像されるが、どのように ψ を選べば κ が大きくなるのかはよく分からない。
 - [KO] では ψ が弧長によるパラメータづけ ($\{x_j\}$ で言えば、等間隔標本点) である場合を考察した。これは最初に思いつくものではあるが、これが本当に良いかどうかは分からない。
 - 上記の二つは領域の形だけから ψ を決定するというものだが、もしかすると境界条件 f の情報を取り入れて有効に利用する手段があるかもしれない。
 - [OSM] では、Fekete 点の利用等が考察されている。
- 問題 [2] について。
 - R の大小の与える影響をまとめておく。
 - R が大 \Rightarrow 滑らかな境界値に対して速い収束
collocation equation が悪条件になりがち
最終誤差² が大きくなりやすい
 - R が小 $\Rightarrow N$ 大きくとれば誤差は小さい (最終誤差は小さい)

collocation equation はあまり悪条件になりにくい
計算量が多くかかりがち

- ψ を何らかの方法で決めた後、 κ (の最大値) をどうやって見積もるかは問題である。 $R \geq \kappa$ と取ってしまい、代用電荷法がうまく働かない可能性がある。 $1 < R < \kappa$ が必要だが、そもそも ψ が与えられても、 κ はすぐには分からない。しかし、次のことはチェックできるし、有用である。

- * 電荷点 $\{y_j\}$ を順に結んだ閉折れ線 ($\sim \Gamma_R$) は単純か (= 自分自身と交わったりしていないか)³。
- * 近似等角写像 $\Psi_{\text{近似}}(Re^{i\theta}) = \sum \alpha_n R^n e^{in\theta}$ の Fourier 係数 $\{\alpha_n R^n\}$ は $|n|$ が大きくなるにつれて、ちゃんと減衰しているか?

- 問題 [3] — N の決定 — について。これについては、次の二つのことをチェックすることが考えられる。

- $|n|$ が大きいところ ($|n| \sim N/2$) で $|\alpha_n| R^n$ は十分小さいか?
- 何らかの方法で誤差を推測して、それが十分小さくなっているか?

4 プログラムについて

4.1 作成方針

- FORTRAN や C で記述したソース・プログラムの形で作成する。前節に述べたような問題がまだ未解決で方法として成熟していないので、当面はブラックボックス形式のプログラムの作成を目指すべきではないであろう。
- 細かいことを考えずに使うことの出来る「お任せ形式」の副プログラム (それは、各種シミュレーション・プログラムへの組み込みも容易にする) を用意するのはもちろんであるが、それらは細かな副プログラムを呼び出すことにより実現する。すなわち、ライブラリを二層構造にして、気軽に使いたいユーザーのためだけでなく、パラメータの細かな調節を自分で行ないたいユーザー双方のための便宜をはかる。

³これが成り立っていない場合は、 Ψ の単射性がなくなっているという可能性が高く、危険である。

- 残念ながら、現時点では公開可能な版は出来ていないが、まとまったものが出来次第、anonymous ftp⁴等で公開し、試用した上での意見を募って改良を続けていく予定である。

4.2 連立一次方程式の解法について

当面は専用のコードは用意しないが（現時点では LINPACK+BLAS を使用している）、将来は N が大きくなったときのため、Rohlin-Greengard のアルゴリズム (citeOkamotoKatsurada を参照) を試験的に組み込むつもりである。

4.3 FFT について

FFT についても専用のコードは用意しない。現時点では Paul N. Swartztrauber の FFTPACK を使用している。これは FORTRAN で書かれているが、FORTRAN プログラムと C プログラムのリンクが出来る環境下では、C プログラムからも簡単に利用可能である。

参考文献

- [K1] M. Katsurada, *Asymptotic error analysis of the charge simulation method in a Jordan region with an analytic boundary*, J. Fac. Sci. Univ. Tokyo, Sect. IA, 1990, **37**, 635–657.
- [K2] M. Katsurada, *Charge simulation method using exterior mapping functions*, JJIAM, 1994, **11**, No.1, 47–61.
- [KO] M. Katsurada and H. Okamoto, *A fundamental solution method for the potential problem*, to appear in
- [OK] 岡本久、桂田 祐史, ポテンシャル問題の高速解法について、平成 4(1992), 応用数理, 第 2 巻・第 3 号, 2 – 20.

⁴明治大学の ftp サーバー ftp.meiji.ac.jp で公開することになると思われる。詳細は筆者 (E-mail: mk@math.meiji.ac.jp) まで問い合わせして下さい。

[OSM] 岡野 大、杉原 正顕、室田 一雄, 代用電荷法の電荷点・拘束点の最適配置について、平成 6(1994), 日本応用数理学会 平成 6 年度会 講演予稿集, 280 - 281.