

3次元代用電荷法の誤差の収束について—球面の場合 Error Convergence of the Charge Simulation Method on Sphere

愛媛大学 大学院理工学研究科 岡野 大 (Dai Okano)

Graduate School of Science and Engineering, Ehime University

東京大学大学院 情報理工学系研究科 杉原正顕 (Masaaki Sugihara)

Graduate School of Information Science and Technology, The University of Tokyo

愛媛大学 大学院理工学研究科 天野 要 (Kaname Amano)

Graduate School of Science and Engineering, Ehime University

1 はじめに

ポテンシャル問題の高速解法として知られる代用電荷法は、その歴史の初期から3次元の問題への適用が行われ、多くの成果もあげてきた。ところが、2次元の場合 [1, 2] に比較して3次元の問題における理論的な研究は遅れており、特に電荷点・拘束点配置に関しては最も単純な球に対する場合にも決定的な方法が知られていない。2次元の場合の理論的な基礎を与える複素解析に相当する数学的な道具の欠如がその原因であるのは明らかである。ここでは、2次元の場合の電荷点・拘束点配置に関して基礎となる単位円板に対する等間隔配置に模して、球面上の一様点を用いた電荷点・拘束点配置について考える。具体的には Rakhmanov ら [5] による Generalized Spiral Points という球面上のエネルギー最小化にもとづく点を用いて好ましい電荷点・拘束点配置が得られることを数値実験で示す。

2 3次元ポテンシャル問題の代用電荷法

代用電荷法では、ポテンシャル問題の近似解を領域で調和な N 個の基本解の線形結合で構成し、境界上の N 個の拘束点と呼ばれる標本点で境界条件を満たすように基本解の重みを定める。適切な基本解と拘束点を用いれば精度の良い近似解を得られることが知られている。Laplace 方程式の Dirichlet 境界値問題

$$\nabla^2 u = 0 \quad \text{in } D, \quad u = g \quad \text{on } \partial D \quad (1)$$

を考えたときに、一般の $d(\geq 2)$ 次元の問題に代用電荷法を適用することは原理的には非常に簡単である。例えば、対数ポテンシャルや Newton ポテンシャルのような点電荷の作

るポテンシャルに対応した基本解を用いることが考えられる,

$$E(\mathbf{x}) = \begin{cases} -\frac{1}{2\pi} \log \|\mathbf{x}\|_2 & d = 2, \\ \frac{\Gamma(d/2 + 1)}{d(d-2)\pi^{d/2}} \frac{1}{\|\mathbf{x}\|_2^{d-2}} & d \geq 3. \end{cases} \quad (2)$$

実際に、2次元問題領域の場合も含めて、代用電荷法を用いたポテンシャル問題の解法では応用が先行している。とくに電気力学の分野では3次元の問題の解法に多くの成果が既に上げられている。そうした応用においては、境界形状や境界条件、その他物理的な要請にもとづく特殊な電荷を用いるという工夫がなされている。例えば、代用電荷法の初期の成果として知られる Steinbigler [6] の研究は回転対称性を持つ電界問題の数値計算において線状や円板状の特殊な電荷を用いるものである。しかし、こうした工夫は一般の領域や境界条件に対する適用の可能性を狭めるものである。

そこで、こうした特殊な電荷を用いることをせずに、よく知られた点電荷を用いた代用電荷法について考える。つまり、(2) に与えられた一般の点電荷にもとづく d 次元の基本解において $d = 3$ とした Coulomb ポテンシャル

$$E_j(z) = E(x_j, z) = \frac{1}{|x_j - z|}, \quad j = 1, \dots, N \quad (3)$$

の電荷を領域外の電荷点 x_1, \dots, x_N におき、その線形結合で近似解を構成した場合の代用電荷法について扱うということである。ここで $|x - y|$ は2点 x, y の Euclid 距離とする。さらに、本節では問題領域を原点を中心を持つ球に限定し、球の場合の電荷点・拘束点の配置方法について議論する。

球に問題を限定したのは、最も簡単な領域形状であることと、2次元の場合において多くの議論の出発点となる円板領域に相当する問題領域であることが理由である。2次元円板領域ではごく自然な同心円上の等間隔な電荷点・拘束点配置

$$\text{電荷点 } x_j = \rho \exp\left(2\pi i \frac{j-1}{N}\right), \text{ 拘束点 } y_k = R \exp\left(2\pi i \frac{k-1}{N}\right) \quad j, k = 1, \dots, N, \quad (4)$$

ただし、問題領域 $D = \{z \mid |z| < \rho, 0 < \rho < R\}$, が適切な配置として知られている。このとき、 D を含む半径 $\rho < r_0$ の円板領域で調和な厳密解 u に対して、 N 個の電荷点・拘束点による代用電荷法の近似解 $u^{(N)}$ の誤差が N について指数関数的に減少することが知られている [1, 2, 3];

$$\sup_{z \in D} |u(z) - u^{(N)}(z)| \leq A \times \begin{cases} R^{-N} & (R^2 \leq r_0) \\ \sqrt{r_0}^{-N} & (\text{上記以外}). \end{cases} \quad (5)$$

ここで A は N によらない正の定数である。

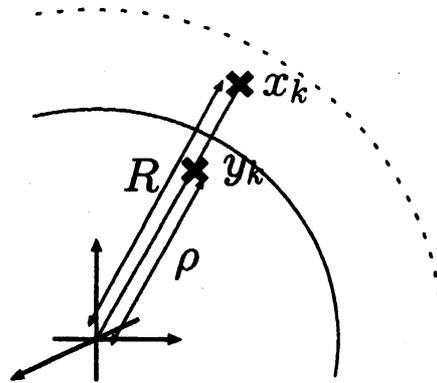


図1 同心球面に配置した電荷点・拘束点

3 球面上の電荷点・拘束点配置

Coulomb ポテンシャルを用いた代用電荷法においては, 同心球面上に以下のように配置した電荷点・拘束点を用いることで, 解くべき連立方程式の係数行列が非特異となり, 必ず解を持つことが知られている [4].

定理 1 (同心球面に配置した電荷点・拘束点による代用電荷法) 半径 ρ の球 D を問題領域とするポテンシャル問題に Coulomb ポテンシャルにもとづく代用電荷法を適用するとき, 以下の手順で定められた電荷点・拘束点の与える係数行列は非特異である.

1. 境界球面上に互いに異なる N 個の点 y_1, \dots, y_N をとり, これを拘束点とする:

$$\text{拘束点 } y_k = (\rho \sin \theta_k \cos \phi_k, \rho \sin \theta_k \sin \phi_k, \rho \cos \theta_k), \quad k = 1, \dots, N, \quad (6)$$

2. 半径 $R > \rho$ の同心球面上に拘束点と等方位に電荷点をとる (図 1):

$$\text{電荷点 } x_j = (R \sin \theta_j \cos \phi_j, R \sin \theta_j \sin \phi_j, R \cos \theta_j), \quad j = 1, \dots, N. \quad (7)$$

□

この定理は緒方ら [4] が一般の $d (\geq 2)$ 次元球に対して得ている結論を $d = 3$ に限って書き直したものである.

定理 1 のもと, 問題領域を球とした場合に, 境界球面上に等間隔の様に配置された拘束点とその同心球上に等方位に配置された電荷点とを考えることは自然である. しかし,

表1 電荷点・拘束点配置に望まれる性質

- 電荷点・拘束点数を自由に選べる.
- 一様性を損なうような未決定のパラメタを持たない.
- 電荷点・拘束点の配置に要する手間が少ない.

代用電荷法での利用に適した球面上の等間隔な点列を定めることは簡単ではない. 多くの場合に最初の候補にあがるであろう正多面体の頂点・面の中心等を用いる方法では, 配置できる電荷点・拘束点の数が著しく限られてしまう. 正20面体をその対称性にもとづいて対称軸回りに回転したものを重ねて用いることで点の数を稼ぐ方法もあるが, 等比級数的に点が増えてしまうので上限は無くとも電荷点・拘束点数の選択に制限は残る. 代用電荷法の帰着する連立方程式の係数行列は密であり, 問題のサイズをむやみに大きくすることは好ましくない. 誤差の指数関数的減少のような性質が期待できるのであれば, それを利用して必要な精度を得るために必要なだけの電荷点・拘束点を選べることが望ましい.

極座標系をとって, 経緯線の等分点を使うという方法も考えられる. この場合は比較的容易に電荷点・拘束点数を調整できるが, 等分する経緯線や座標軸の選び方をどうするかという問題が残る. やり方によっては異方性の高い配置になり, 近似解の性能が境界条件に大きく依存してしまうことも考えられる.

電荷点・拘束点を均等に配置することを目的にするなら最適化の手法を使って球面上の均等分布を計算するということが考えられる. 例えば, 球面上に配置した2点間に相互作用 $|x - y|$ を導入し, 球面上に仮に配置された拘束点を総エネルギー

$$\sum_{j \neq k} |y_j - y_k| \quad (8)$$

を最大化するように反復的に改良することで均等に配置された拘束点を求めるという方法である. この方法のコストが高すぎることは明らかである. 電荷点・拘束点の配置に最適化問題を必要とするのでは, 簡便性という代用電荷法の特徴を無意味にしてしまう.

以上を踏まえて問題領域を球とした場合のポテンシャル問題に代用電荷法を適用するにあたっての電荷点・拘束点配置の方法には表1のような性質が望まれる. そして, 得られた配置による代用電荷法の近似解が円板領域の場合の等間隔配置のように望ましい性質を持つことが期待される.

先に述べた, 総エネルギーを極大・極小化するような点を球面上で求めるという問題には長い歴史があり, 様々な研究が成されている. この問題は次のように球面上の点の集合

$\omega_N = \{z_1, \dots, z_N\}$ と 2 点間の相互作用 $e(\alpha, x, y)$ を用いて一般化することができる。

■球面上のエネルギー極大 (極小) 化問題 単位球面上にとられた N 個の点の集合

$$\omega_N = \{x_1, \dots, x_N \mid |x_j| = 1, j = 1, \dots, N\} \quad (9)$$

に対して, 総エネルギー $\epsilon(\alpha, \omega_N)$ を 2 点間の相互作用 $e(\alpha, x, y)$ を用いて定義する:

$$\epsilon(\alpha, \omega_N) = \sum_{1 \leq j < k \leq N} e(\alpha, x_j, x_k), \quad (10)$$

$$e(\alpha, x, y) = \begin{cases} \log \frac{1}{|x-y|} & (\alpha = 0) \\ |x-y|^\alpha & (\alpha \neq 0) \end{cases} \quad (\alpha \in \mathbb{R}, |x| = |y| = 1). \quad (11)$$

ここで, $|x-y|$ は 2 点間の距離である. 総エネルギーの極大値, 極小値

$$\epsilon(\alpha, N) = \begin{cases} \sup_{\omega_N \subset S^2} \epsilon(\alpha, \omega_N) & (\alpha > 0) \\ \inf_{\omega_N \subset S^2} \epsilon(\alpha, \omega_N) & (\alpha \leq 0) \end{cases} \quad (S^2 = \{z \mid |z| = 1\}) \quad (12)$$

を与える ω_N を球面上のエネルギー極大 (極小) 化点と呼ぶ.

代用電荷法の電荷点・拘束点として, このエネルギー極大 (極小) 化点を単純に利用するというのでは先にあげたコストに関する条件を満たせない. そもそも球面上のエネルギー極大 (極小) 化問題自体が一般の α, N に対しては未解決の問題である.

一方, $\epsilon(\alpha, N)$ について $-2 < \alpha < 2$ の場合の N に対するふるまい

$$\epsilon(\alpha, N) = \begin{cases} -\frac{1}{4} \log \frac{4}{e} N^2 - \frac{1}{4} N \log N + B_0 N + C_0 \log N + O(1) & (\alpha = 0), \\ -\frac{2^\alpha}{2+\alpha} N^2 - B_\alpha N^{1-\alpha/2} + C_\alpha N^{-\alpha/2} + O(N^{-1-\alpha/2}) & (\alpha \neq 0) \end{cases} \quad (13)$$

が知られている. そこで, Zhou ら [5] は, 一般的な非線形最適化の手法を用いてエネルギー $\epsilon(\alpha, \omega_N)$ を最大化することで, エネルギーの極大・極小値の近似値を

$$\epsilon(\alpha, N), \quad \alpha = -1, 0, 1, N \leq 200 \quad (14)$$

の範囲で全て求め, それをフィッティングに用い (13) の係数 B_α, C_α を定めて $\epsilon(\alpha, N)$ ($\alpha = -1, 0, 1$) の推定を行なった.

さらに, こうして得られたエネルギー極大・極小値の近似値に近い総エネルギーの値を N の広い範囲で与える球面上の点列, すなわちエネルギー極大 (極小) 化点の近似となる Generalized Spiral Points を次に示すように定めている.

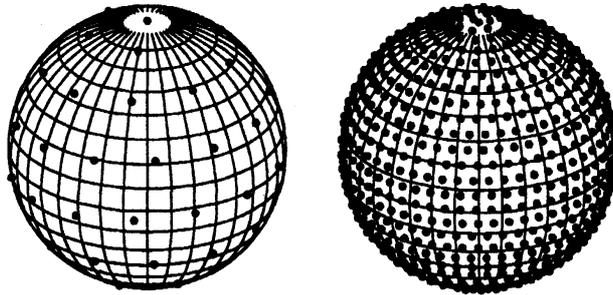
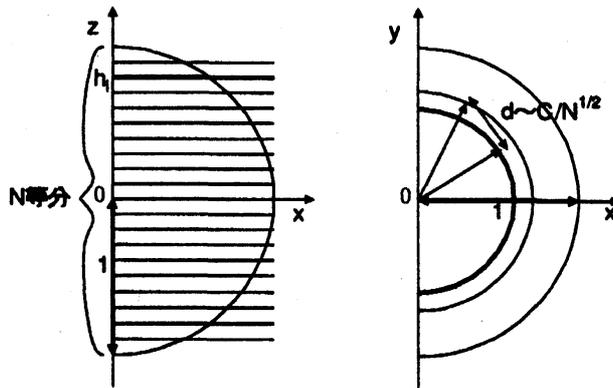


図2 Generalized Spiral Points(左 $N = 64$, 右 $N = 1000$, $C = 3.6$)

■ Generalized Spiral Points



単位球面の極座標表示を考え,

$$h_k = -1 + 2 \frac{k-1}{N-1} \quad (k = 1, \dots, N), \quad (15)$$

$$\theta_k = \arccos(h_k), \quad (16)$$

$$\phi_k = \begin{cases} 0 & (k = 1, N) \\ \phi_{k-1} + \frac{C}{\sqrt{N}} \frac{1}{\sqrt{1-h_k^2}} & (k = 2, \dots, N-1) \end{cases} \quad (17)$$

としたとき, $\{(\sin \theta_k \cos \phi_k, \sin \theta_k \sin \phi_k, \cos \theta_k), k = 1, \dots, N\}$ を単位球面上の Generalized Spiral Points とする. 実際に, $C = 3.6$ としたときの Generalized Spiral Points による総エネルギーが最適化によってエネルギーの極大(極小)値をよく近似することが確認されている.

- 球面上に配置される点の数 N は任意に選べる.
- エネルギーの極大(極小)化の意味で一様な配置である.
- 球面上の配置の計算が非常に易しい.

という性質を持つ Generalized Spiral Points を問題領域が球の場合の代用電荷法における電荷点・拘束点として利用しようとするのは自然である。

具体的に、例えば以下のように Generalized Spiral Points を電荷点・拘束点として同心球上に配置することが考えられ、このとき、定理 1 により代用電荷法の係数行列は非特異で、解くべき連立方程式は必ず解を持つ。

■ Generalized Spiral Points を用いた電荷点・拘束点配置

1. $C = 3.6$ の場合の単位球面上の Generalized Spiral Points

$$z_k = (\sin \theta_k \cos \phi_k, \sin \theta_k \sin \phi_k, \cos \theta_k), \quad k = 1, \dots, N \quad (18)$$

を用いて問題領域である半径 ρ の球面上に拘束点をとる:

$$\text{拘束点 } y_k = \rho z_k, \quad k = 1, \dots, N \quad (19)$$

2. 半径 $R > \rho$ の同心球面上に拘束点と等方位に電荷点をとる:

$$\text{電荷点 } x_j = R z_j, \quad j = 1, \dots, N \quad (20)$$

4 数値実験例

Generalized Spiral Points を使った代用電荷法の電荷点・拘束点の性能を実際に数値実験を行うことによって調べる。

具体的には、以下の 4 通りの点列にもとづいて電荷点・拘束点を用意する。

- Generalized Spiral Points ($C = 3.6$)
- 近似的エネルギー最小化点
- 正多面体の頂点
- 立方体表面の格子点

それぞれの方法で得られる点列を単位球面上に配置し、これを拘束点とする。さらに半径 $R > 1$ の同心球上に、拘束点と等方位に、電荷点をとる。定理 1 により、こうして定義された電荷点・拘束点を用いた代用電荷法において解くべき連立方程式の係数行列は非特異であるので、何らかの近似解が必ず得られる。近似解の誤差を単位球面における最大誤差を用いて評価し、電荷点・拘束点配置の方法ごとに比較する。

Generalized Spiral Points 以外の電荷点・拘束点配置について以下に説明する。

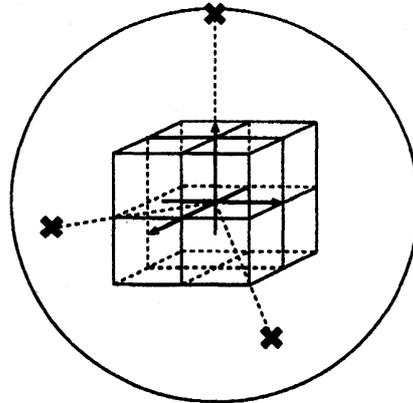


図3 立方体表面の格子点を利用した電荷点・拘束点配置

- 近似的エネルギー最小化点にもとづく電荷点・拘束点
Generalized Spiral Points 自体もある意味で近似的なエネルギー最大(小)化点と呼べるが,ここで利用するのは,球面上の補間や重み付き積分のための分点に関する Sloan・Womersley ら [7, 8] の研究の一環として公開されている $\alpha = -1$ の場合の単位球面のエネルギー最小化点の近似点列である. Womersley はこの点列データに関して反復的改良を繰り返し,より低いエネルギーを与える点列の発見ごとに更新をするということをしており,数値実験では 2003 年 1 月 24 日に更新された最新データを利用する.
- 正多面体の格子点にもとづく電荷点・拘束点
正 4・6・8・12・20 面体の中心を原点におき,原点と各頂点を結び放射状の半直線と単位球面の交点を単位球面上の点列として利用する.
- 立方体表面の格子点にもとづく電荷点・拘束点 (図 3)
中心を原点に持つ立方体を $n \times n \times n$ 等分する立方格子を考える. 格子点のうち,立方体表面に現れる $6n^2 + 2$ 点と原点を結ぶ放射状の半直線と単位球面の交点を単位球面上の点列として利用する.

4.1 実験結果 1(全領域で調和な厳密解)

厳密解として,全領域で調和な関数

$$u(r, \theta) = r \cos \theta \quad (21)$$

を考えた場合の最大誤差の減少の様子を電荷点・拘束点配置法ごとに図 4 に示す。ここで横軸は電荷点・拘束点数 N の平方根 \sqrt{N} 、縦軸は最大誤差としている。この問題に対して、いずれも球面上に比較的一様に電荷点・拘束点をとることになる 4 つの方法は同様の最大誤差の減少を与えると言える。誤差の減少はおよそ、

$$\max |u - u^{(N)}| \leq c\tau^{-\sqrt{N}} \quad (c > 0, \tau > 1) \quad (22)$$

という関係を保っている。電荷点・拘束点が配置される領域が球面上の 2 次元に広がっていることを考え併せれば、単位円板を問題領域とした場合の誤差の指数関数的減少から類推される自然な結果と考えられる。以後、電荷点・拘束点数と最大誤差の上式のような関係を誤差の指数関数的減少と呼ぶ。また、実験結果を見る限り Generalized Spiral Points による電荷点・拘束点配置の方法は他の方法に劣ることは無い。任意の数の電荷点・拘束点を用意できる分は有利であると言える。

4.2 実験結果 2(調和領域が制限された厳密解)

次に電荷点・拘束点配置を Generalized Spiral Points と近似的なエネルギー最小化点にもとづく場合に限り、厳密解を

$$u(r, \theta) = \frac{1}{|r^2 + r_0^2 + 2r_0r \cos \theta|^{1/2}} \quad (23)$$

とした場合、すなわち原点からの距離が $r_0 > 1$ の z 軸上の点に置いた Coulomb ポテンシャルの作る調和関数の近似を用いて最大誤差の指数関数的減少の様子を詳しく検討する。このとき、厳密解は問題領域である単位球外の点で発散し、境界を越えての調和領域の拡張がこの特異点で制限される。2次元円板領域の場合の代用電荷法では、こうした調和領域の拡張限界半径 r_0 と電荷点の置かれる円の半径 R によって最大誤差の減少の程度を定める定数 $c > 0$, $\tau > 1$ が決まることが知られている。また、ここでは z 軸上に置いた Coulomb ポテンシャルの特異点の位置を軸からずらしても同様の結果を得ている。

次に、誤差の指数関数的減少の様子と、電荷点を配置した同心球の半径 R との関係を図 5 に示す。電荷点を境界から離すほど誤差の減少速度が大きくなる様子が分かる。さらに Generalized Spiral Points にもとづく電荷点・拘束点配置の $N = 4, \dots, 100$ の場合の最大誤差に関して、最大二乗誤差を最小にする方法でのフィッティングを行い誤差減少の傾きを調べる (図 6)。厳密解の調和拡張の限界点が境界面から十分に離れていれば、誤差の指数関数的減少のパラメータ τ が $R > 0$ に比例することが分かる。

さらに r_0 と τ についても調べたが、 R の場合のような顕著な結果は得られなかった。

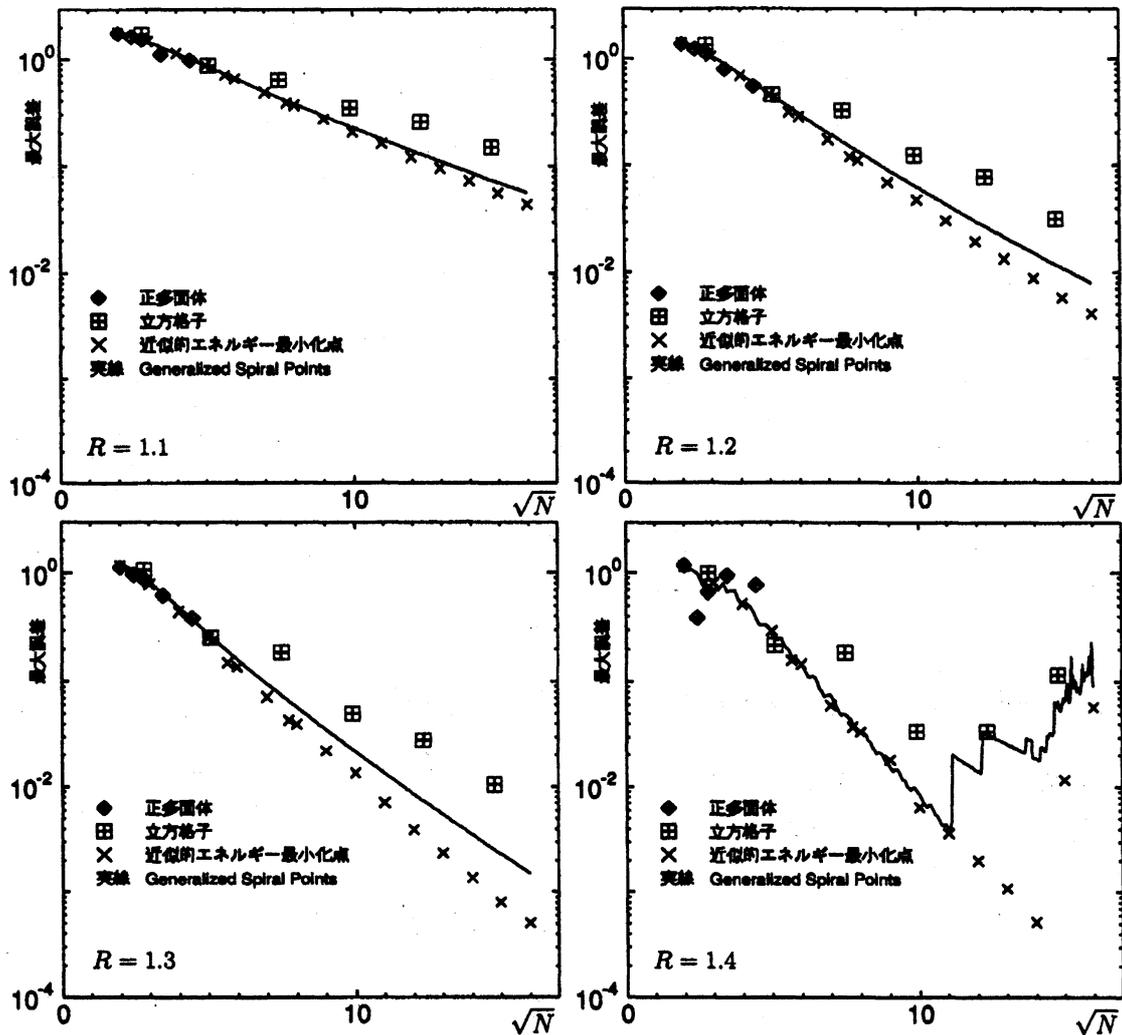


図4 全領域で調和な厳密解に対する代用電荷法の最大誤差

厳密解 $u(z) = r \cos \theta$, 近似的エネルギー最小化点 $N = 4 \sim 256$ の 18 組, Generalized Spiral Points $N = 4, 5, \dots, 256$.

5 おわりに

以上の結果をまとめると, 代用電荷法の 3 次元問題領域への適用において, 基礎となるであろう単位球領域を考えた場合に, Generalized Spiral Points を電荷点・拘束点に用いることが有効であること, そのとき, 代用電荷法の与える近似解の最大誤差は

$$\max |u - u^{(N)}| \leq c\tau^{-\sqrt{N}} \quad (c > 0, \tau > 1) \quad (24)$$

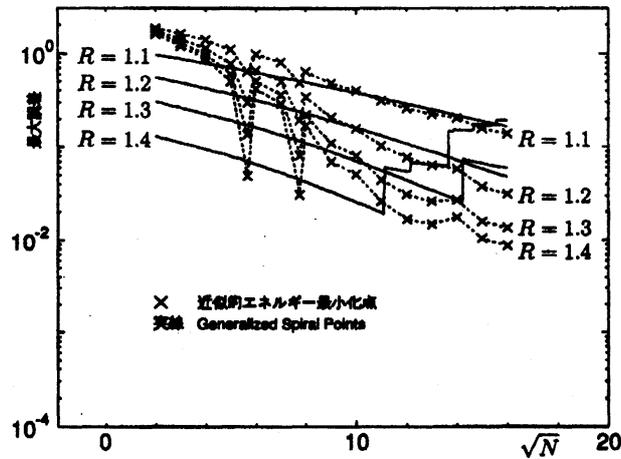


図5 代用電荷法の誤差と R の関係

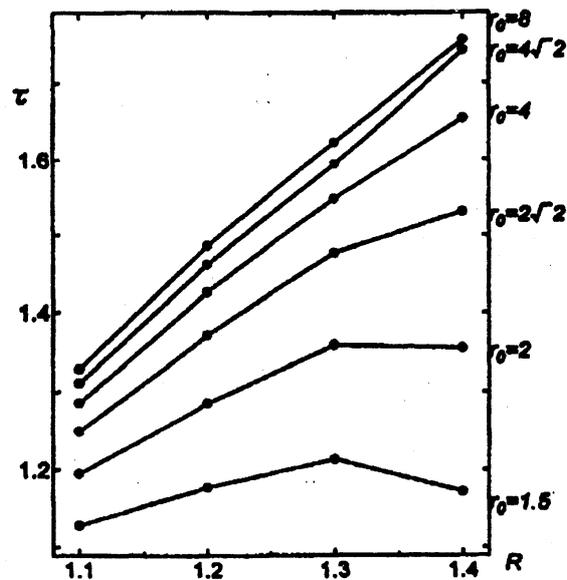


図6 最大誤差の指数関数的減少のパラメタ τ と R の関係

という \sqrt{N} に対する指数関数的減少を見せるということが示唆された。

さらに、指数関数的減少のパラメタには

$$\tau \sim R \quad (25)$$

という 2次元円板領域の場合と同様の性質も期待されるということも示された。

しかしながら、本論文では、その提案する電荷点・拘束点配置の方法に対する理論的な検討はされていない。

エネルギー最大化と代用電荷法との間の関連も不明であるが Generalized Spiral Points を用いる場合の利点は精度ではなく電荷点・拘束点数が自由に選べることにある。誤差評価に関して、正多面体、立方格子を用いた方法等、その他の方法においても著しい差は生じていない。したがって、ここで扱ったエネルギーの最大(小)化という問題が代用電荷法の電荷点・拘束点配置と何らかの意味で関わりを持つことが示唆される。

以上の事実を併せて、エネルギー最大(小)化問題を解くことにかかる手間を考えれば、Generalized Spiral Points が、電荷点・拘束点数の選択の自由度と配置法の簡便さから最も良い電荷点・拘束点配置の方法と言える。

参考文献

- [1] KATSURADA, M. and OKAMOTO, H. A mathematical Study of the Charge Simulation Method I, *J. Fac. Sci., Univ. Tokyo, Sec.IA*, **35**, 3 (1988), 507–518.
- [2] KATSURADA, M. and OKAMOTO, H. On the Collocation Points of the Fundamental Solution Method for the Potential Problem, *Computers Math. Applic.*, **31**, 1 (1996), 123–137.
- [3] MUROTA, K. Comparison of Conventional and “Invariant” Schemes of Fundamental Solutions Method for Annular Domains, *Japan. J. Indust. Appl. Math.*, **12**, 1 (1995), 61–85.
- [4] OGATA, H., OKANO, D., SUGIHARA, M. and AMANO, K. Unique Solvability of the Linear System Appearing in the Invariant Scheme of the Charge Simulation Method, *Japan. J. Indust. Appl. Math.*, **20**, 1 (2003), 17–35.
- [5] RAKHMANOV, E. A., SAFF, E. B. and ZHOU, Y. M. Minimal Discrete Energy on the Sphere, *Math. Res. Lett.*, **1**, 6 (1994), 647–662.
- [6] SINGER, H., STEINBIGLER, H. and WEISS, P. A Charge Simulation Method for the Calculation of High Voltage Fields, *IEEE Transactions on Power Apparatus and Systems*, **93** (1974), 1660–1688.
- [7] SLOAN, I. H. and WOMERSLEY, R. S. Extremal Systems of Points and Numerical Integration on the Sphere, *Adv. Comput. Math.*, **21**, 1-2 (2004), 107–125.
- [8] WOMERSLEY, R. S. and SLOAN, I. H. How Good can Polynomial Interpolation on the Sphere be?, *Adv. Comput. Math.*, **14**, 3 (2001), 195–226.