数理解析研究所講究録
1016巻 1997年 58-67

ポテンシャル問題の数値解法

岡本 久 (Hisashi Okamoto)
京都大学 数理解析研究所
〒606-01 京都市左京区北白川追分町
okamoto@kurims.kyoto-u.ac.jp

キーワード: 代用電荷法, 渦法, 高速算法

1 はじめに

領域 Ω での Dirichlet 問題

$$\begin{cases} -\triangle u = 0 & (x \in \Omega) \\ u = \phi & (x \in \partial\Omega) \end{cases}$$

の数値計算法には実に多くのものが考案されてきた. 有限要素法や差分法は古典的であるし (菊地 [16], 田端 [32]), 比較的新しい境界要素法などもその理論的基礎はかなり明らかになっている (岡本・中村 [24], 磯 [9]). 定義されている領域Ωが簡単なものならば, FORTRAN あるいはCなどという言語を知らなくても Mathematicaで計算できるであろう. 言い換えれば (領域がそれほどひどく複雑なものでない限り) Dirichlet 問題を数値的に解くのはそう難しいことではないのである. にもかかわらず本稿では世にあまり知られていない代用電荷法の紹介をあえてすることにする. その動機は, Dirichlet 問題をただでできるだけ簡単に解きたい, という願望によるのである. なるほど, 有限要素法を用いれば解を得ることはできる. しかし, 能率のよい有限要素法のプログラムを数値解析のアマチュアに書かせることは無理があるし, かといって有限要素法のオートマチックなプログラムを買うとそこそこ高いものにつく. 代用電荷法を使えば, 連立一次方程式を解くプログラムさえ書くだけで, 誰でも簡単に近似解が得られる. これは私のようにお金のない研究者には大変な魅力である. 一方, 代用電荷法の数学的基礎にはまだ不明な点が多く, これも魅力のひとつである. 以下では代用電荷法がどのようなものか紹介し, わたしにとって解決したい数学上の諸問題を概括したい. 筆者は拙論 [22] において, 代用電荷法に関するいくつかの問題提起をしたが, その後多少の発展もあったので, ここにそのいくつかをまとめてみたい. ただ, ここでふれるのは筆者および筆者の尊敬する友人たちによって得られた結果に集中しており, 多くの重要な結果について述べていないが, これはもっぱら筆者の不勉強によるものであり, 読者諸氏のお許しをお願いする次第である.

2 代用電荷法

代用電荷法は級数展開法の変形あるいはスペクトル法の一種ということもできるかもしれない．この方法にはいろいろな変形があるが，そのうちもっとも簡単なものを紹介しよう．簡単のために，領域は 2 次元有界領域であると仮定する．代用電荷法の中で一番単純なものは

$$u_N(x) = \sum_{n=1}^{N} a_n \log|x - y_n| \qquad (\, x \in \Omega \,) \tag{1}$$

という形で近似解を構成する．ここで，a_n は定数であり，点 y_n は領域Ωの外部の適当な点である．明らかに近似解は調和であるから，何らかのルールで境界条件を近似的に満たすようにすればよい．未知定数 $\{a_n\}$ は N 個あるから，境界上の N 個の点をうまくとって，

$$u_N(x_j) = \phi(x_j) \qquad (1 \le j \le N)$$

なる N 個の条件を与えると未知定数 $a_n(1 \le n \le N)$ が求まるであろう．これが代用電荷法のアイデアである．y_nを電荷点，x_n を拘束点と呼ぶことにする．ベクトル $(a_1, a_2, \cdots, a_N)$ は連立方程式

$$\begin{pmatrix} \log|x_1 - y_1| & \log|x_1 - y_2| & \cdots & \log|x_1 - y_N| \\ \log|x_2 - y_1| & \log|x_2 - y_2| & \cdots & \log|x_2 - y_N| \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \log|x_N - y_1| & \log|x_N - y_2| & \cdots & \log|x_N - y_N| \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ a_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \phi(x_1) \\ \phi(x_2) \\ \cdot \\ \cdot \\ \phi(x_N) \end{pmatrix}$$

の解として定まるのである．

代用電荷法を 3 次元で考えるときには 3 次元の基本解 $\Gamma(x) = \frac{1}{4\pi|x|}$ を使って，

$$u_N(x) = \sum_{n=1}^{N} a_n \Gamma(x - y_n) \tag{2}$$

という形で近似解を構成すればよい．

$N \to \infty$ のときに，$\{x_j\}$ と $\{y_k\}$ をうまくばらまけば近似解 u_N は解 u に何らかの位相で収束する，というのが我々の期待するところであるが，事態はそれほど単純でない．そもそも，上記の連立方程式が一意な解を持つには係数行列が正則行列でなくてはならないが，これはいつもそうだとは限らないのである (Katsurada[11])．

そもそも，N および a_n や y_n を適当に動かしたときに，(1) の形の関数族が $C(\partial\Omega)$ あるいは $L^2(\partial\Omega)$ で稠密なのかどうかも自明ではない．しかし，次の定理が証明できる：

定理 1 (関数族の稠密性) Ω を 3 次元有界領域でその境界は滑らかであるとする．$\partial\Omega$ を内部に含む曲面 S を考える．$\{w_j\}_{j=1}^{\infty}$ を S 上の相異なる稠密な点集合とする．このとき $L^2(\partial\Omega)$ で

$$\Gamma(z - w_j) \qquad (j = 1, 2, \cdots)$$

の線形結合全体は稠密である．2 次元の場合には定数関数を付け加えればやはり稠密である．

証明は [23] にあるので参照いただきたい. この定理によって 3 次元の場合には代用電荷法が無意味なものでないことがわかる. しかし, 問題はどのようにして簡単に a_n や y_n を定めるかである.

代用電荷点の長所と短所を一覧にしてみよう：

- 代用電荷点の優れた点
  1. プログラミングが簡単である
  2. 領域の形状が穏やかならば高精度である
  3. 小さな N でよい近似が得られるので, 計算機のメモリーを食わない
- 代用電荷点の問題点
  1. 変数係数の微分方程式には使えない
  2. 領域の形状が複雑になると精度が急速に落ちる
  3. $\{x_j\}$ や $\{y_k\}$ をどうとったら良いかの指針に乏しい— 多少の指針はある (後述)
  4. 係数行列の条件数が非常に大きい
  5. 経験則に頼る度合が高い.

3 いくつかの注意

代用電荷法は調和関数以外にも適用できる. Laplace 作用素 $\triangle$ に限る必要はない. 定数係数楕円型で基本解が初等的に書ければ同じアイデアで計算できる. 近似解を作る時に基本解を使う必要は必ずしもない. Dipole を使ってもよい. 調和多項式を使ってもよい. とは言え, 使える方程式は限られている. しかし, ポテンシャル問題は, 電磁気学, 流体力学, 極小曲面理論などの応用上頻出するので, 代用電荷法の有用性はそれほど低くはないように思える. たとえば, 等角写像を精密に計算することは応用上も重要であるが, これは代用電荷法を用いると精度よく求められる. これについては天野要氏の一連の結果を参照されたい ([1]). また, 流体の水面波の計算はポテンシャル問題の応用のひとつと考えられるが, Shōji[30] は代用電荷法の水面波への応用のひとつである.

定理 1 からもわかるように, 2 次元領域の場合, 対数ポテンシャルだけでは近似解を構成出来ないこともある. 次の例は龍谷大学の四ツ谷晶二教授から教えていただいたものである. Ω は 2 次元単位円板に含まれると仮定する. このとき, y_n はすべて単位円周上にとるものとする. すると, (1) の u_N は a_n をどう選んでも原点でゼロになるので, 原点でゼロにならない調和関数は近似できないのである.

この例を見る限りでは (1) で近似解を求めるのは無謀に見える. しかし, これは早まった見方である. というのも, このような領域でも, 半径が 1 以外の円周から y_n をとれば近似が可能になるからである. つまり, ある意味では, y_n の配置に関して almost surely に係数行列は正則なのである. (これは, 係数行列の行列式が $(y_1, \cdots, y_N)$ の実解析関数であることから従う.)

この例からもわかるように 2 次元領域では対数ポテンシャルだけでなく定数関数も含めておいた方が安全ではある. このようなアルゴリズムに室田のアルゴリズムがある ([20]).

このアルゴリズムは相似変換について近似解が不変になるという点でも優れている. また, 井上のアルゴリズム ([8]) も注目に値する.

さて, 代用電荷法の欠点でもあり, 長所でもあるのが「自由度が高い」ということである. たとえば, y_n はΩ の外部でありさえすればどこにとってもよい. これだけ自由度が多いとどう選ぶのかまよってしまうが, 応用上は Ω の外部に適当な閉曲線をとってその上に y_n をとることが多いようである. どのような場合にどのような配置をとるのがよいのか, そのノウハウは村島 [19] に詳しいのでここでは述べない.

たとえ係数行列が正則であっても, その条件数は極めて大きい ([3, 10]), 一般に, その条件数は, N について指数的に (=幾何級数的に) 増大する. 従って, 大きな N については a_n に容認できない大きさの誤差が交じってしまい, 代用電荷法は役に立たなくなると思える. しかし, これは必ずしもそうではない. この重要な事実については Kitagawa[17] を参照されたい.

4 誤差の指数的減少

Ω が 2 次元円板の場合には電荷点 $\{y_n\}$ を適当な同心円上に等間隔に並べるのがベストであろう. これは直感的にあきらかであるが, 実際に誤差評価をしてみるといくつかの面白いこともわかる ([10]). 特に重要なのは, 実解析的な ϕ については誤差が $N \to \infty$ のとき指数的に減少するという性質である. このような性質はスペクトル法ではおなじみであるが, 有限要素法や差分法では成り立たないものである.

誤差が小さいという意味は次の E が小さいという意味で使うことにする:

$$E = \sup_{\|\phi\|_1 \leq 1} \|u - u_N\|_2$$

ここで $\| \ \|_1$ は $\partial\Omega$ 上の関数に対する何らかのノルムであり, $\| \ \|_2$ は Ω 上の関数に対する何らかのノルムである. この E を小さくする $\{y_n\}$, $\{x_n\}$ を選ぶ指針を知りたいのである.

E が小さくなるのは ϕ の族するクラスを解析的な関数族に制限する場合である. 例えば, Ω を 2 次元円板とし,

$$K_\rho = \{v \in C^\infty(S^1)\ ;\ |\alpha_n|\rho^{|n|} \text{ が有界数列 } \}$$

なる関数族を考えよう. $1 < \rho$は与えられた正定数であり, α_n は関数 v の Fourier 係数である：$v(\theta) = \sum_n \alpha_n e^{in\theta}$. K_ρ には

$$\|v\|_1 = \sup_n |\alpha_n|(1 + \rho^{|n|})$$

なるノルムを入れよう. このとき

$$E = \sup_{\|\phi\|_1 \leq 1} \sup_{x \in \partial\Omega} |u(x) - u_N(x)|$$

を最小にする $\{x_n\}$, $\{y_n\}$ の位置を知りたい. 杉原 [31] によれば, $R \geq \sqrt{\rho}$ のとき

$$\min_{|x_j|=1, |y_k|=R} E \geq \frac{1}{2}\rho^{-N/2}$$

である.

[10, 31] では

$$x_j = \exp(2\pi\sqrt{-1}(j-1)/N), \qquad y_j = R\exp(2\pi\sqrt{-1}(j-1)/N) \qquad (1 \le j \le N)$$

(平面を複素表示している) とおいて, 誤差を上から評価し, $R \geq \sqrt{\rho}$ のとき

$$E \leq c(\rho)\rho^{-N/2}$$

が成り立つことを示している. これで代用電荷法が漸近誤差評価の意味でほぼ最良のものであることがわかる.

さて, 一般の領域ではこんなうまい誤差評価はできない (楕円領域ならば楕円座標を使うことによって誤差解析が可能である [21]). しかし, Ω が単連結ならば等角写像を使って, 単位円板に関する同心円上の等間隔点を写したものを電荷点・拘束点にとることは自然であろう. こうすると実際誤差解析は可能である ([12, 13]). しかし, 等角写像を数値計算することは Dirichlet 問題の解を計算することに帰着されるのであるから, そのままでは役に立つアルゴリズムとは言えない. しかし, このアイデアを少し改良することによって実用的な計算法が見い出される ([14, 15]). これについては次の節で述べる.

領域 Ω を一般の有界領域とすると, 電荷点を定めた時の最良の拘束点配置は何かという問いに対しては杉原 [31] の定理がベストに近い答えを与えてくれる. この定理を述べるために次の定義をおく：

定義 1 $y_k \in \overline{\Omega}^c$ を固定する.

$$\max_{x_j \in \partial\Omega} |\det(\log|x_j - y_k|)|$$

を達成する点 $x_1, x_2 \cdots, x_N \in \partial\Omega$ を Fekete 点と呼ぶ.

定理 2 (杉原正顯 [31]) Fekete 点を拘束点に使った場合, 誤差は最良誤差の $N+1$ 倍で抑えられる.

最良誤差は N について指数的に減少することが望めるから Fekete 点を拘束点に使えばほぼ最良の誤差を得ることができる. しかし, 残念なことに Fekete 点の実際の計算は複雑である. それに非現実的なほどの計算時間がとられたら意味がない. 筆者は Fekete 点を簡単に計算するアルゴリズムを知りたいが, いまのところこれを知らない.

5 電荷点の配置

上記問題とは逆に, 拘束点を適当に決めた時の最良の電荷点配置は何か, という問いには [14] のアルゴリズムが役に立つように思われる. このアルゴリズムは FFT を使うだけで簡単に実行できるので実際の計算にも有効である. 次の仮定をおこう.

仮定：

1. Ω は単連結で $\partial\Omega$ は C^ω 級

2. $\phi \in C^\omega(\partial\Omega)$

この仮定の下で, 適当な $\kappa > 1$ と,

$$B_\kappa = \{z \in \mathbf{C}\,;\, 1/\kappa < |z| < \kappa\ \}$$

から$\partial\Omega$ の適当な近傍への等角写像 Φ で, $\{|z| = 1\}$ を $\partial\Omega$ に写すものが存在する (ここでも $\mathbf{C}$ と $\mathbf{R}^2$を同一視している). 実際, $\partial\Omega$ のひとつのパラメーター表示

$$[0, 2\pi) \ni s \mapsto \sum_{n=-\infty}^{+\infty} a_n \exp(\sqrt{-1}n\pi s)$$

をとるとき,

$$\Phi(z) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} a_n z^n$$

とすればよい. これに応じて次のようにアルゴリズムを組み立てる：

1. $1 < R < \kappa$ を取る,
2. $y_k = \Phi(R\exp(\sqrt{-1}(k-1)\pi/N) \qquad (1 \le k \le N)$,
3. $x_j = \Phi(\exp(\sqrt{-1}(j-1)\pi/N) \qquad (1 \le j \le N)$,

Φ は FFT を使って簡単に近似計算できる (具体的な方針については [14] 参照):

$$\Phi(z) \sim \sum_{n=-N+1}^{N} a_n z^n$$

従って, 大した苦労もなく計算が可能になる. できるだけ大きい κ をとれる Φ がいいアルゴリズムを生み出す, ということになるが, これがどういうふうにすれば得られるかはよくわからない. もうすこし詳しいことについては [14] を参照されたい.

6 残された問題

電荷点を与えたときの最良の拘束点については前々節で, 拘束点を与えたときの (準) 最良の電荷点については前節で述べた. では $\{x_n\}, \{y_m\}$ を様々にうごかして最良のものを選ぶにはどうしたらよいか？ これが私にはよくわからないのである. 逐次近似的に解く, という 岡野-杉原-室田 [25] が役に立つ情報を与えてくれるが, 解決までにはまだまだやるべきことが多い.

3 次元領域での代用電荷法も, 実験では有用性が確かめられているが, その数学的な誤差解析は進んでいないようである. そもそも球面で囲まれた領域であっても「等間隔」という言葉がそのままでは意味をなさないから, どう解析してよいかわからない.

代用電荷法の応用としては天野による等角写像の近似がまずあげられる ([1]). 他にも [19] には多くの応用があげられているが, 数学的な問題として, 極小曲面の描画が筆者の気がかりである. いわゆる Plateau 問題は調和関数の境界値問題に帰着されるのであるから ([4]), 代用電荷法を用いると非常に簡単に極小曲面を描いてくれるプログラムが書けるはずである. これは教育的にも役に立つはずである.

7 Poisson 方程式の Dirichlet 問題

本節では非斉次項がある場合, すなわち, Poisson 方程式

$$\begin{cases} -\triangle u = f & (x \in \Omega) \\ u = \phi & (x \in \partial\Omega) \end{cases}$$

を考える. 純粋に理論的に考えれば, Poisson 方程式の境界値問題は

$$w(x) = \int_\Omega \Gamma(x-y) f(y) dy \qquad (\Gamma \text{ は基本解}) \tag{3}$$

を考えることによって調和関数の Dirichlet 問題

$$\begin{cases} -\triangle v = 0 & (x \in \Omega) \\ v = \phi - w & (x \in \partial\Omega) \end{cases}$$

に帰着されるのであるが, 数値計算上は両者に大きな違いがある. それは積分 (3) の計算に大きな手間がかかるからである. 関数 f に対する標本点が M 個あったとき, ひとつの x について (3) を計算するのに $O(M)$ の計算量がかかるが, 通常, 計算が必要な x の個数も M 程度であるから, 積分の計算には $O(M^2)$ の計算量が必要となる. 代用電荷法での分割が $O(N)$ の程度であれば, 領域上の関数 f の標本点は $M = O(N^2)$ 程度必要となり, 積分 (3) には $O(N^4)$ の計算量が必要となる. これは重荷である.

ところで, 非圧縮流体の数値計算に有効な方法として渦法 (vortex method [2, 26]) があるが, この方法では積分 (3) の計算がある意味で不可欠となっている. 従って, (3) を高速に計算する方法を考案することは大変重要なのである. (3) の計算上一番問題となるのは, この積分が特異積分である, ということである. そこで A. J. Chorin は vortex blob approximation なるものを考え出したのである. これは, 特異な核 E を次のように平滑化してから近似する方法である：まず,

$$\psi \in C^\infty(R^2), \qquad \epsilon > 0$$

を適当に選んで

$$\psi_\epsilon(x) = \frac{1}{\epsilon^2}\psi(\epsilon x)$$

と定義する. そして, 合成積

$$E_\epsilon = E * \psi_\epsilon \quad \in \quad C^\infty$$

を定義するのである. さらに, (3) を

$$w_\epsilon(x) = \int_\Omega E_\epsilon(x-y) f(y) dy$$

と近似し, 右辺を (たとえば) 中点則で近似する:

$$w_\epsilon^h(x_j) = h^2 \sum_{k=1}^{N} E_\epsilon(x_j - x_k) f(x_k).$$

ここで, x_k は幅 h の正方格子点を表す. これらの計算に要する $O(M^2)$ の計算量を $O(M \log M)$ あるいは $O(M)$ で計算する方法がいろいろと開発されつつある ([26, 5, 6, 7]). ϵ と h をどういう割合で小さくしていったらよいか, ということについても Puckett に詳しい. いくつかの応用は [27, 28, 29] およびその中の引用文献を参照していただきたい. また, 積分 (3) の計算については [18] も参考になる.

References

[1] K. Amano, A charge simulation method for the numerical conformal mapping of interior, exterior and doubly-connected domains, J. Comp. Appl. Math., vol. 53 (1994), pp. 353–370., 天野 要, 代用電荷法に基づく双方向的な数値等角写像の方法, 情報処理, 第 31 巻 (平成 2 年), pp. 623–632.

[2] A.J. Chorin, Vorticity and Turbulence, Springer Verlag, (1994).

[3] S. Christiansen, Condition number of matries derived from two classes of integral equations, Math. Meth. Appl. Sci., vol. 3 (1981), 364–392.

[4] R. Courant, Dirichlet's Principle, Conformal Mapping, and Minimal Surfaces, Interscience Publ., (1950), (Springer Verlag で 1977 に再版).

[5] C.I. Draghicescu, SIAM J. Numer. Anal., vol. 31 (1994), pp. 1090–1108.

[6] C.I. Draghicescu and M. Draghicescu, J. Comp. Phys., vol. 116 (1995), pp. 69–78.

[7] L. F. Greengard, The Rapid Evaluation of Potential Fields in Particle Systems, MIT Press, (1988).

[8] T. Inoue, 本研究集会での講演.

[9] 磯 祐介, 境界要素法の数理, 数学, (1989).

[10] M. Katsurada and H.Okamoto, A mathematical study of the charge simulation method I, J. Fac. Sci., Univ. of Tokyo, Sect. IA, vol. 35 (1988), pp. 507–518.

[11] M. Katsurada, A mathematical study of the charge simulation method II, J. Fac. Sci., Univ. of Tokyo, Sect. IA, vol. 36 (1989), pp. 135–162.

[12] M. Katsurada, Asymptotic error analysis of the charge simulation method in a Jordan region with an analytic boundary, J. Fac. Sci., Univ. of Tokyo, Sect. IA, vol. 37 (1990), pp. 635–657.

[13] M. Katsurada, Charge simulation method using exterior mapping functions, Japan J. Indus. Appl. Math., vol. 11 (1994), pp. 47–61.

[14] M. Katsurada and H. Okamoto, On the collocation points of the fundamental solution method for the potential problem, Int. J. Comp. Math. Appl., vol. 31 (1996), pp. 123–137.

[15] M. Katsurada, The collocation points of the charge simulation method, to appear in Proceedings of the Third Japan-China Symposium on Numerical Mathematics.

[16] 菊地 文雄, 有限要素法概説, サイエンス社.

[17] T. Kitagawa, On the numerical stability of the method of fundamental solution applied to the Dirichlet problem, Japan J. Indus. Appl. Math., vol. 5 (1988), 123–133, T. Kitagawa, Asymptotic stability of the fundamental solution method, J. Comp. Appl. Math., vol. 38 (1991), 263–269.

[18] 森下 博, 小林 尚弘, 高市英明, 天野 要, 四ツ谷晶二, 代用電荷法によるポアソン方程式の数値計算, 情報処理学会論文誌, vol. 38 (1997), pp. 1483–1491.

[19] 村島 定行, 代用電荷法とその応用, 森北出版 (1983).

[20] 室田一雄, 代用電荷法におけるスキームの「不変性」について, 情報処理学会論文誌, 3 4 巻 (1993), pp. 533–535.

[21] 西田 詩, 2 次元楕円領域における代用電荷法の数学的及び数値的考察, 日本応用数理学会論文誌, vol. 5 (1995), pp. 185–198.

[22] 岡本 久, 代用電荷法における数学的問題について, 京都大学数理解析研究所 講究録 vol. 703 (1989), pp. 141–156.

[23] 岡本 久, 桂田 祐史, ポテンシャル問題の高速解法について, 応用数理, 第二巻 第三号 (1992), pp. 2–20.

[24] 岡本 久, 中村 周, 関数解析 I, II, 岩波書店 (1997).

[25] 岡野 大, 杉原正顯, 室田一雄, 投稿中.

[26] E.G. Puckett, Vortex methods: An introduction and survey of selected research topics, in " Incompressible Computational Fluid Dynamics Trends and Advances, eds. M.D. Gunzburger and R.A. Nicolaides, Cambridge Univ. Press, (1993), pp. 335–407.

[27] T. Sakajo and H. Okamoto, Numerical computation of vortex sheet roll-up in the background shear flow, Fluid Dynam. Res., vol. 17 (1996), pp. 195–212.

[28] T. Sakajo and H. Okamoto, An application of Draghicescu's fast summation method to vortex sheet motion, 数理解析研究所講究録, # 974, pp. 1-20.

[29] T. Sakajo and H. Okamoto, The application of PVM to the computation of vortex sheet motion, to appear in Gakuto International Series 11.

[30] M. Shōji, An application of the charge simulation method to a free boundary problem, J. Fac. Sci., Univ. Tokyo, Sect. IA, vol. 33 (1986), pp. 523–539.

[31] 杉原正顯, 調和関数の近似について, 京都大学数理解析研究所 講究録, No. 676 (1988), pp. 251–261.

[32] 田端 正久, 微分方程式の数値解法, 岩波書店 (1994)