

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 α_j ,

$\dots, \alpha_N$ 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、

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

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、 $\overline{\Omega}$ 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。そこで、 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)。

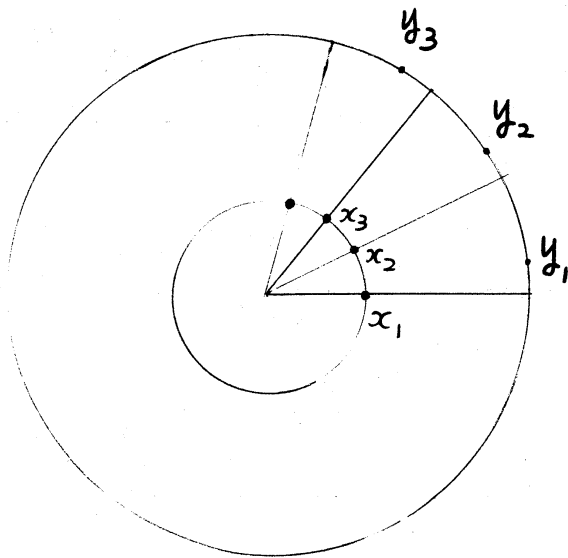
ここで、 $\theta_0 \in [0, \frac{2\pi}{N})$

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 $H^k(S')$ 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 $\{x_i\}$, $\{y_j\}$ をとったほうが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：

$\{x_i\}$ 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 $x_1, \dots, x_N \in \partial\Omega$, $y_1, \dots, y_N \in \mathbb{R}^2 \setminus \overline{\Omega}$ 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,

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

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 $\overline{\Omega}$ 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, $\overline{\Omega}$ 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。

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

これによつて、アルゴリズム (4) の代わりに、

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

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。

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

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

$$u_\alpha(t, x) = \int_0^1 E(t, x-y) u_0(y) dy + \int_0^t E(t-s, x+\alpha) g_0(s) ds - \int_0^t E(t-s, x-1-\alpha) g_1(s) ds$$

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

ここで, g_0, g_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, g_0 と g_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, $g_0(s), g_1(s)$ 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 $\{g_i(n\tau)\}$ さえ決めればよい。 $\beta_n = g_0((n-1)\tau)$, $\gamma_n = g_1((n-1)\tau)$ ($n=1, \dots$) とおく。

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

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

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

$$n \in \mathbb{N} \text{ に対して } 1 \leq n \leq \infty \text{ として } u_\alpha(n\tau, 0) = u_\alpha(n\tau, 1) = 0 \text{ より,}$$

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

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

ここで、数列 $\{a_m\}$ と $\{b_m\}$ を、

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

で定義する。これは、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、 $|\varepsilon_n| \leq c |\varepsilon_1| \quad (\forall n)$ 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小してゆき、 $a > 1.90118$ 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