

代用電荷法の最適電荷配置に関する考察

鈴木智博[†] 鈴木嘉彦[†]

ラプラス方程式の近似解法である代用電荷法には複雑な境界の問題に対しては適用が困難であるという短所がある。代用電荷法が複雑な境界に対して適用が困難な理由は、代用電荷の配置の問題に対して理論的な考察がなされていないため、試行錯誤によってこれを決定しなければならないからである。精度の良い近似解を得るためににはただ単に電荷数を増やしただけではかえって誤差が大きくなることがあり、適切な位置に電荷を配置することが必要である。本稿の目的は、電荷の配置を含めた最適な代用電荷を求めることがある。そのため代用電荷法の誤差評価に境界上の二乗誤差を表す評価関数を導入し、これを最小にするような電荷の位置および電荷量を求める方法を議論した。また、代用電荷法の誤差は電荷の位置だけでなく拘束点の位置にも依存していることを示した。拘束点も電荷点と同様に適切な配置でなければ数を増やしてもかえって誤差が大きくなる場合がある。このため計算者が拘束点を選ぶ必要がないような評価関数を導入し、これにより拘束点を選ぶ場合よりも良好な近似精度が得られた。

Optimal Charge Assignment for the Charge Simulation Method

TOMOHIRO SUZUKI[†] and YOSHIHIKO SUZUKI[†]

The charge simulation method (CSM) is used to obtain a numerical solution of the Laplace equation. It is difficult to apply CSM to problems with a complicated boundaries. This is because there is no convenient method for charge assignment. The purpose of this paper is to present a method of obtaining the optimal set of charge values and their positions. In order to find them, we introduce an estimating function expressing the square error of a numerical solution on the boundary. Moreover, we show that the error of CSM also depends on the position of the reference points where the numerical solution is supposed to take the prescribed boundary values precisely, that is, the error becomes large when the position of the reference points is not suitable. To avoid this disadvantage, we introduce an estimating function without the reference points. This gives us an improvement of the precision of the numerical solution.

1. まえがき

静電気的に荷電粒子間の電気的引力、斥力はクーロンの法則に従う。このクーロンの法則を電荷の占めていない任意の点で、電位について記述したものがラプラス方程式である。真空中に置かれた電極の周囲の電場を知りたい場合には、このラプラス方程式を与えられた境界条件のもとに解かなければならない。しかし、任意の形状の電極に対して解析的にこれを解く方法は存在しないので、数値的に解くことが必要となる。

ラプラス方程式の近似解法には、有限要素法、境界

要素法、そして本稿で取り上げる代用電荷法などがある。代用電荷法は、無限領域の問題、ノイマン問題への適用が可能であることや、単純なアルゴリズムであるために一つの近似解を得るために必要な計算時間が短く、なめらかな境界に対しては比較的高い近似精度が得られるといった特徴がある反面、境界形状の複雑な場への適用が困難であるという特徴を持っている¹⁾。

代用電荷法が境界形状が複雑な場への適用が困難な理由の一つは、代用電荷の配置の問題に対して理論的には未だ明確な結果が得られていないからである。これまでには代用電荷の配置は試行錯誤によって決定されていた。

本文の目的は、電荷の配置を含めた最適な代用電荷を求めることがある。そのため代用電荷法の誤差評価に境界上の二乗誤差を表す関数を導入し、これを最小

[†] 山梨大学工学部電子情報工学科

Department of Electrical Engineering and Computer Science, Faculty of Engineering, Yamanashi University

にする電荷の位置および電荷量を求める方法を議論する²⁾.

代用電荷法の近似解精度を向上させるために、境界形状を考慮した方法³⁾や、境界上の拘束点において二乗誤差を最小にする方法¹⁾等がある。文献 3) は等電位線と電気力線が互いに直交する性質を利用して、拘束点において境界条件と直交性の二つの条件を満足するような電荷量を決定する方法であり、文献 1) は境界上の拘束点において二乗誤差を最小にするという点で本稿で議論する方法と同じであるが、解として得られるのは電荷量のみである。本稿の方法では最適解として電荷の位置が得られるため、これまで議論できなかった電荷配置問題に対して一つの解答を与えることができる。

2. 代用電荷法

代用電荷法では幾つかの点電荷を仮想し、各点電荷が作る電場をグリーン関数によって表し、これを重ね合わせることによって電場を表している。代用電荷法の原理を以下に示す。

図 1 に示すような外部領域 D における二次元ラプラス方程式のディリクレ問題を考える。

$$\nabla^2 \phi(x, y) = 0, \quad (x, y) \in D. \quad (2.1)$$

$$\phi(x, y) = f(p), \quad (x, y) \in C. \quad (2.2)$$

ここで C は領域 D の境界で、 $f(\cdot)$ は C 上で定義された連続関数、 p は境界上の点である。

領域外の適当な位置 $r_i = (x_i, y_i)$ に N 個の代用電荷を配置し(図 1 の × 点)，その電位関数の重ね合わせとして、式(2.1)，(2.2)の近似解 $\phi(x, y)$ を

$$\phi(x, y) = \sum_{i=1}^N q_i G(x, y; x_i, y_i), \quad (x, y) \in D, \quad (2.3)$$

と表す。ここで q_i は代用電荷の電荷量を表す未定係数、 $G(x, y; \xi, \eta)$ は二次元ラプラス方程式のグリーン関数である。



図 1 ディリクレ問題

Fig. 1 Dirichlet problem.

C is the boundary of domain D , $f(\cdot)$ is the continuous function defined on C and p is the point on C .

代用電荷の位置 $r_i = (x_i, y_i)$ は領域 D の外部の点であるのでグリーン関数は領域 D の内部で調和であり、これを重ね合わせた上式もまた領域 D の内部で調和関数となり、ラプラス方程式を満たす。

次に、近似解 $\phi(x, y)$ が境界条件を満足するように未定係数 q_i を決定する。境界 C 上に代用電荷の数 N に等しい数の拘束を設け(図 1 の ● 点)，この点において境界条件を満足するような q_i を求める。つまり拘束点 p_j の座標を (\bar{x}_j, \bar{y}_j) としたとき、 p_j における近似解の値が、

$$\phi(p_j) = \sum_{i=1}^N q_i G(p_j; r_i) = f(p_j), \quad j=1, 2, \dots, N, \quad (2.4)$$

を満たすような q_i を求める。 $G_{ji} \equiv G(p_j; r_i)$ と表すと、上式は以下のように行列を用いて表すことができる。

$$\begin{pmatrix} G_{11} & G_{12} & \cdots & G_{1N} \\ G_{21} & G_{22} & \cdots & G_{2N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ G_{N1} & G_{N2} & \cdots & G_{NN} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q_1 \\ q_2 \\ \vdots \\ q_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f(p_1) \\ f(p_2) \\ \vdots \\ f(p_N) \end{pmatrix}. \quad (2.5)$$

式(2.5)は q_i に関する N 元連立一次方程式である。これを解いて q_i を式(2.3)に代入することによって近似解 $\phi(x, y)$ が得られる。以上が代用電荷法の概要である。

代用電荷法には以下の特徴があることがわかる。利点として挙げられるのは、原理が単純であるため簡単に近似解を求めることができることである。近似解を得るために必要な計算は、基本的にはグリーン関数 G_{ji} の計算と連立一次方程式(2.5)を解くことのみである。また、比較的滑らかな境界に対しては計算量のわりには高い精度が得られることが挙げられる。

問題点としては、代用電荷の数が同じでも電荷の位置によって誤差の値が異なることや、代用電荷の数を増やしても、その位置によっては必ずしも誤差は小さくならないことが挙げられる。複雑な境界を持つ問題に対して適用が困難な理由は、複雑な境界形状に対してはその形状を表現するために拘束点数を多くとらねばならず、それに伴って代用電荷の数も増えるため、上のような理由から、満足できる近似精度を得るために試行錯誤の回数が増す、あるいはそのような解が得られないためである。

以上のことをから、代用電荷法によって境界値問題を解くためには、境界形状に対して適当と思われる代用電荷数を設定し、満足できる近似精度が得られるまで代用電荷の位置を変化させ計算を繰り返し行うことが

必要である。

3. 評価関数を最小にする代用電荷法

代用電荷法において精度の良い近似解を得るために、配置する電荷の電荷量だけでなくその位置も考慮しなければならないことをすでに述べた。これはもともと配置する代用電荷の位置および電荷量が未知であるのに、電荷量のみを未知変数として境界条件に適合させるためである。それならば始めから代用電荷の位置および電荷量を未知変数として扱うのが自然である。

本章では、代用電荷の位置および電荷量を未知変数として扱う方法を提案する。

また、従来の方法では代用電荷の数に等しい数の拘束点を境界上に設けて、この点において境界条件を満足するように電荷量を決定している。しかし、これは拘束点においては境界条件を満たしているが、それ以外の点においての境界条件は無視されていることになる。そこで近似解の境界条件からのずれを表す誤差評価関数を新たに導入し、最適化問題として代用電荷法を定式化する。

3.1 誤差評価関数

拘束点における境界値と近似解との二乗誤差を表す評価関数を定義する。

$$R = \sum_{j=1}^M \left\{ \sum_{i=1}^N q_i G(p_j; r_i) - f(p_j) \right\}^2. \quad (3.1)$$

ここで q_i は電荷点 $r_i = (x_i, y_i)$ における代用電荷の電荷量、 $G(p_j; r_i)$ は電荷点 r_i を核とした拘束点 $p_j = (\bar{x}_j, \bar{y}_j)$ での二次元グリーン関数、 $f(p_j)$ は拘束点 p_j での境界値、 N, M はそれぞれ電荷と拘束点の数である。式(3.1)において、 $N=M$ である必要はないので M を増やすことによって高い近似精度が得られることが期待できる。

評価関数 R を最小にする代用電荷の位置 (x_i, y_i) および電荷量 q_i は以下の式を満たす。

$$\begin{aligned} \partial R / \partial q_1 &= \partial R / \partial q_2 = \cdots = \partial R / \partial q_N \\ &= \partial R / \partial x_1 = \partial R / \partial x_2 = \cdots = \partial R / \partial x_N \\ &= \partial R / \partial y_1 = \partial R / \partial y_2 = \cdots = \partial R / \partial y_N = 0. \end{aligned} \quad (3.2)$$

以降、上式を満たすような電荷量 q_i および電荷の位置 (x_i, y_i) を持つ代用電荷のことを最適電荷と呼ぶ。

4. 非線形方程式の解法

従来の代用電荷法は未知変数が電荷量だけであった

ため必要な計算は、グリーン関数の計算と連立一次方程式(2.5)を解くことのみであった。しかし最適化問題としての代用電荷法では、式(3.2)で与えられる非線形方程式を解く必要があり、しかも未知変数の数は従来の方法の3倍となっている。したがって、この非線形方程式をいかに効率良く解くかが大きな問題となる。

4.1 ホモトピー法

最適電荷を求めるためには非線形方程式(3.2)を解かなければならない。非線形方程式の解法として最もよく知られているのはニュートン法であるが、これは周知の通り大域的収束性やヤコビ行列の正則性等の制約がある。

今回、非線形方程式(3.2)の解法としてはニュートンホモトピーを用いたホモトピー法⁴⁾を適用した。ニュートンホモトピーは他のホモトピーに比べて解曲線が素直な振舞いを示す。複数解を求める場合に適している等の特徴がある⁵⁾。ホモトピー法の概要を以下に示す。

いま、対象とする連続な非線形方程式を $\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{0} (\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, \mathbf{f} : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n)$ とする。既知な解 \mathbf{x}^0 を持つ補助方程式を $\mathbf{g}(\mathbf{x}) = \mathbf{0} (\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, \mathbf{g} : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n)$ とする。関数 \mathbf{g} を連続な関数 $\mathbf{h} : \mathbb{R}^n \times [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}^n$ で連続的に関数 \mathbf{f} に変形する、つまり $\mathbf{h}(\mathbf{x}, 0) = \mathbf{g}(\mathbf{x}), \mathbf{h}(\mathbf{x}, 1) = \mathbf{f}(\mathbf{x})$ とする。このような \mathbf{h} を \mathbf{f} と \mathbf{g} の間のホモトピーと呼ぶ。

ホモトピー \mathbf{h} の解曲線は数学的にはゆるい条件のもとで、有限な数のなめらかなパスあるいはループになることが知られている⁴⁾。この解曲線を追跡することによって、既知な解 \mathbf{x}^0 を初期点として、 $\mathbf{h}(\mathbf{x}, 1) = \mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$ の解を得ることができる。

ニュートンホモトピーとは補助方程式を $\mathbf{g}(\mathbf{x}) = \mathbf{f}(\mathbf{x}) - \mathbf{f}(\mathbf{x}^0)$ としたもの、つまり \mathbf{h} を

$$\begin{aligned} \mathbf{h}(\mathbf{x}, t) &= (1-t)\mathbf{g}(\mathbf{x}) + t\mathbf{f}(\mathbf{x}) \\ &= \mathbf{f}(\mathbf{x}) - (1-t)\mathbf{f}(\mathbf{x}^0), \end{aligned} \quad (4.1)$$

としたものである。

4.2 なめらかなパスの追跡

$\mathbf{h}(\mathbf{x}, 1) = \mathbf{0}$ を満たす \mathbf{x} を求めるために上で述べたパスの追跡アルゴリズムを示す⁴⁾。以下では、 $\mathbf{z} \in \mathbb{R}^{n+1} (\mathbf{z} = \mathbf{x}, z_{n+1} = t)$ 、 $\mathbf{D}\mathbf{h}$ を \mathbf{h} のヤコビ行列とする。

step 1 適当な初期値 \mathbf{z}^0 (ただし、 $z_{n+1}^0 = 0$) と許容誤差 $\epsilon > 0$ 、きざみ $\delta > 0$ を決め、 $k = 0$ とする。

step 2 $\mathbf{v}^0 \in \mathbb{R}^{n+1}$ を以下の式によって計算する。

$$\mathbf{D}\mathbf{h}(\mathbf{z}^0)\mathbf{v}^0 = 0, \|\mathbf{v}^0\| = 1, v_{n+1}^0 > 0$$

step 4 へ進む。

step 3 v^k を以下の式によって計算する。

$$\mathbf{D}\mathbf{h}(\mathbf{z}^k)\mathbf{v}^k=0, \|\mathbf{v}^k\|=1, (\mathbf{v}^{k-1})^T \mathbf{v}^k > 0$$

step 4 $\mathbf{y}^k \in \mathbf{R}^{n+1}$ を以下の式によって計算する。

$$\mathbf{y}^k = \mathbf{z}^k + \delta \mathbf{v}^k$$

step 5 次の $\mathbf{u} \in \mathbf{R}^{n+1}$ を変数とした方程式、

$$\mathbf{h}(\mathbf{u})=0, (\mathbf{v}^k)^T(\mathbf{u}-\mathbf{y}^k)=0$$

に対し、 $\mathbf{u}^0 = \mathbf{y}^k$ を初期値として、ニュートン法を適用する。その反復は、 $\|\mathbf{h}(\mathbf{u}^r)\| < \epsilon$ で終了し、 $\mathbf{z}^{k+1} = \mathbf{u}^r$ とする。

step 6 $z_{n+1}^{k+1} < 1$ ならば、 $k=k+1$ として、**step 3** へもどる。 $z_{n+1}^{k+1} \geq 1$ ならば終了。

以上が、パスの追跡アルゴリズムである。

最終的には、 \mathbf{z}^{k+1} を初期値として $\mathbf{f}(\mathbf{x})=\mathbf{0}$ をニュートン法を用いて解くことにより解を得る。

5. 最適電荷の計算法

以下では簡単のために式(3.1)の評価関数の境界値を境界上で一定値 α を取るもの（つまり $f(\mathbf{p}) \equiv \alpha$ ）として以下の評価関数 R を用いる。

$$R = \sum_{j=1}^M \left\{ \sum_{i=1}^N q_i G(p_j; r_i) - \alpha \right\}^2. \quad (5.1)$$

また、二次元ラプラス方程式のグリーン関数として、半無限領域でのグリーン関数；

$$G_{ij} = G(p_j; r_i) \\ = \frac{1}{2\pi} \ln \sqrt{\frac{(\bar{x}_j - x_i)^2 + (\bar{y}_j + y_i)^2}{(\bar{x}_j - x_i)^2 + (\bar{y}_j - y_i)^2}}, \quad (5.2)$$

を用いるものとする。 $\partial R / \partial q_k = 0$ より、

$$q_1 \sum_{j=1}^M G_{j1} G_{jk} + q_2 \sum_{j=1}^M G_{j2} G_{jk} + \dots \\ + q_N \sum_{j=1}^M G_{jN} G_{jk} - \alpha \sum_{j=1}^M G_{jk} = 0. \quad (5.3)$$

$\partial R / \partial x_k = 0$ より、

$$q_1 \sum_{j=1}^M G_{j1} \frac{\partial G_{jk}}{\partial x_k} + q_2 \sum_{j=1}^M G_{j2} \frac{\partial G_{jk}}{\partial x_k} + \dots \\ + q_N \sum_{j=1}^M G_{jN} \frac{\partial G_{jk}}{\partial x_k} - \alpha \sum_{j=1}^M \frac{\partial G_{jk}}{\partial x_k} = 0. \quad (5.4)$$

$\partial R / \partial y_k = 0$ より、

$$q_1 \sum_{j=1}^M G_{j1} \frac{\partial G_{jk}}{\partial y_k} + q_2 \sum_{j=1}^M G_{j2} \frac{\partial G_{jk}}{\partial y_k} + \dots \\ + q_N \sum_{j=1}^M G_{jN} \frac{\partial G_{jk}}{\partial y_k} - \alpha \sum_{j=1}^M \frac{\partial G_{jk}}{\partial y_k} = 0. \quad (5.5)$$

今、上式において、

$$G_{ij} := \sum_{k=1}^M G(p_k; r_j) G(p_k, r_i),$$

$$g_i := \sum_{k=1}^M G(p_k; r_i), \\ G_{ij}^x := \sum_{k=1}^M G(p_k; r_j) \frac{\partial G(p_k; r_i)}{\partial x_i}, \\ g_i^x := \sum_{k=1}^M \frac{\partial G(p_k; r_i)}{\partial x_i}, \\ G_{ij}^y := \sum_{k=1}^M G(p_k; r_j) \frac{\partial G(p_k; r_i)}{\partial y_i}, \\ g_i^y := \sum_{k=1}^M \frac{\partial G(p_k; r_i)}{\partial y_i}, \\ i, j = 1, \dots, N, \\ \mathbf{G} = [G_{ij}], \mathbf{g} = \{g_i\}, \\ \mathbf{G}^x = [G_{ij}^x], \mathbf{g}^x = \{g_i^x\}, \\ \mathbf{G}^y = [G_{ij}^y], \mathbf{g}^y = \{g_i^y\}, \\ \mathbf{q} = \{q_i\}, \\ i, j = 1, \dots, N,$$

の記号で表すと、式(5.3), (5.4), (5.5)の連立方程式は以下のように表せる。

$$\mathbf{G}\mathbf{q} = \alpha \mathbf{g}. \quad (5.8)$$

$$\mathbf{G}^x \mathbf{q} = \alpha \mathbf{g}^x. \quad (5.9)$$

$$\mathbf{G}^y \mathbf{q} = \alpha \mathbf{g}^y. \quad (5.10)$$

式(5.8), (5.9), (5.10)は \mathbf{q} に関しては線形な方程式であるから、式(5.8)を \mathbf{q} について解き、式(5.9), (5.10)に代入して、以下の式を得る。

$$\mathbf{G}^x \mathbf{G}^{-1} \mathbf{g} - \mathbf{g}^x = 0. \quad (5.11)$$

$$\mathbf{G}^y \mathbf{G}^{-1} \mathbf{g} - \mathbf{g}^y = 0. \quad (5.12)$$

上式より、最適化問題としての代用電荷法は、代用電荷の位置 $r_i = (x_i, y_i)$ を変数とした非線形方程式を解く問題に帰着することがわかる。式(5.11), (5.12)の連立方程式を前章のホモトピー法によって解くことにより最適電荷の位置を求め、これを式(5.8)に代入して電荷量を求めることができる。

次章に簡単な例を示す。

6. 数 值 実 験

図2に示すような六角形の導体について、導体の周囲の電位分布を代用電荷法を用いて近似する。配置する代用電荷の数は6個とする。

図3, 図4, 図5にそれぞれ拘束点数を18, 20, 24個の場合の拘束点の位置(●), 最適電荷の位置(○), および、最適電荷の作る境界値 α の等電位線を示す。この等電位線が境界形状に等しければ、近似解と真の解との誤差が零であるといえる。また、図6に式(4.1)のパラメータ t と R の関係を示す。

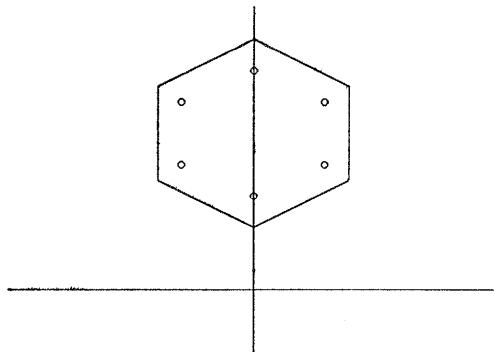


図 2 境界形状と電荷点
Fig. 2 Boundary form and charge points.

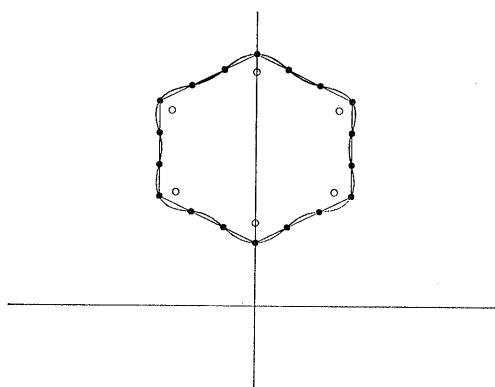


図 4 拘束点数 20
Fig. 4 Equipotential line of α , $N=6$, $M=20$.

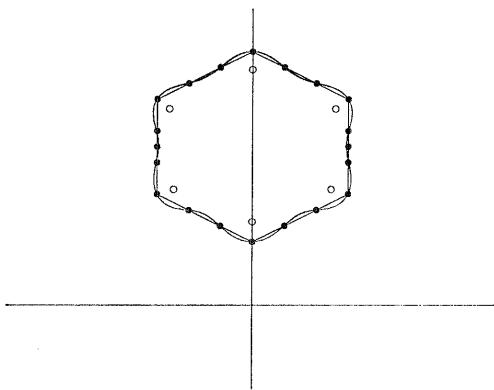


図 3 拘束点数 18
Fig. 3 Equipotential line of α , $N=6$, $M=18$.

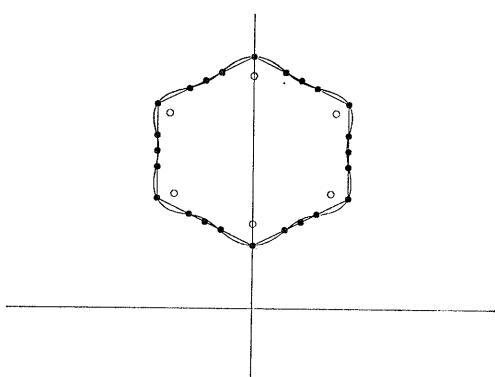


図 5 拘束点数 24
Fig. 5 Equipotential line of α , $N=6$, $M=24$.

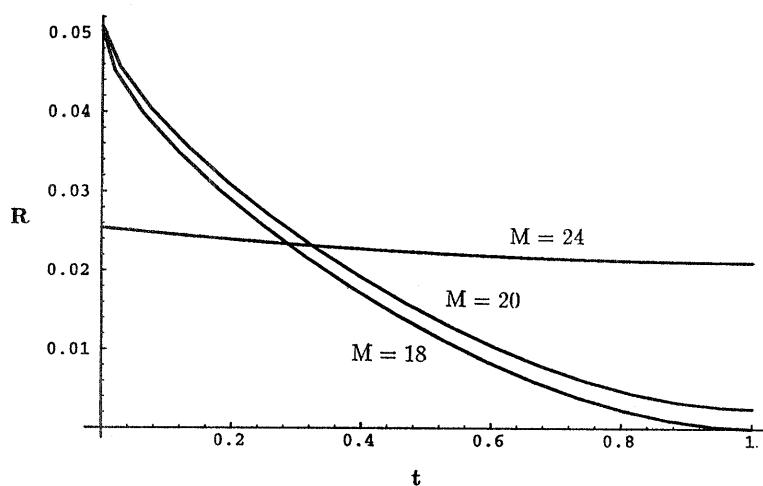


図 6 t と各拘束点数に対する R の関係
Fig. 6 Relationship between parameter t and estimating function R .
 M is the number of reference points.

表 1 に各拘束点数の評価関数 R および各拘束点での平均の誤差を表す R/M の値を示す。

図 6 より、初期値で与えた電荷の位置での R の値が、 t を増加させるにしたがって減少していく様子がわかる。(ただし、 $M=24$ については $M=18, 20$ の場合と初期値が異なる。) $t=0$ では電荷の位置は計算者が適当に選んだもので、電荷量は式(5.8)を満たすように選ばれているのみであり、これは文献 1) の最小二乗法的に境界条件を満足させる場合に相当する。 t の増加にともなって電荷の位置が最適な位置に近付き R の値が減少していく。このことから、電荷の配置が適切でなければ精度の良い近似解が得られないことがわかる。

表 1 より、拘束点数が 18 個の場合には R の値が小さく、ほとんどの拘束点において境界条件を満足していることがわかる。拘束点数が 20 個の場合は 18 個の場合に比べて R の値が非常に大きくなっている。図 4 の拘束点は図 3 の拘束点に 2 点加えたものであるが、これによって他の拘束点においては逆に境界条件との整合が悪くなり、結果として評価関数の値が大きくなってしまうことがわかる。

以上の結果より、近似解の精度を良くするために代用電荷の配置が適切であること、また単に拘束点数を増すだけではかえって逆の効果となる場合があり、電荷と同様拘束点も適当な位置に配置する必要があると言える。

7. 誤差評価関数 E

真の解と近似解との差を近似解の誤差と考えると、調和関数の性質から誤差は境界上で最大値を持つ。近似解の境界全体での誤差を評価するために、以下のようない誤差評価関数 E を導入する。

$$E = \int_C \left\{ \sum_{i=1}^N q_i G(p(s); r_i) - \alpha \right\}^2 ds. \quad (7.1)$$

ここで、 $\int_C (\cdot) ds$ は境界 C に沿った線積分である。また、 $p(s)$ は境界 C 上の位置ベクトルである。これは

Table 1 Error estimation with R .
 M is the number of reference points.

M	R	R/M
18	1.52E-18	8.44E-20
20	2.52E-03	1.26E-04
24	2.11E-02	8.79E-04

式(5.1)において拘束点数を無限個にした場合に相当する。

各拘束点数における誤差評価関数 E の値を表 2 に示す。

表 2 からも拘束点数を増やしたからといって必ずしも近似解精度が良くはならないことがわかる。

近似解は選んだ拘束点においては境界条件を満たすかあるいは境界条件に近い値を示すが、それ以外の点においては境界条件は無視されていることになる。従来の代用電荷法と比べて拘束点数が増えた分、同じ電荷数で不適切な位置に電荷を配置した場合と比べれば、精度は向上しているだろうが本質的な改善にはなっていない。

近似精度を比較するために誤差評価関数 E を新たに導入したが、これを用いて近似精度を評価するのであれば、評価関数 R を最小にするような代用電荷を求めるのではなく、評価関数 E を最小にするような代用電荷を求めればよい。これにより拘束点も計算者が選ぶ必要がなくなり、前述の問題も解決できる。

評価関数として R に代わって E を採用すると式(5.6)は以下となる。

$$\begin{aligned} G_{ij} &= \int_C G(p(s); r_j) G(p(s), r_i) ds, \\ g_i &= \int_C G(p(s); r_i) ds, \\ G_{ii}^x &= \int_C G(p(s); r_i) \frac{\partial G(p(s); r_i)}{\partial x_i} ds, \\ g_i^x &= \int_C \frac{\partial G(p(s); r_i)}{\partial x_i} ds, \\ G_{ii}^y &= \int_C G(p(s); r_i) \frac{\partial G(p(s); r_i)}{\partial y_i} ds, \\ g_i^y &= \int_C \frac{\partial G(p(s); r_i)}{\partial y_i} ds. \end{aligned} \quad (7.2)$$

上式を用いて式(5.11), (5.12)を、前章同様電荷数 6 として解いた結果を図 7 に示す。またこの場合、評価関数 E の値は 0.122 となり、評価関数 R を用了めた場合よりもかなり小さな値となっている。

Table 2 Error estimation with E .
 M is the number of reference points.

M	E
18	0.595
20	0.581
24	0.597

また、同様に評価関数 E を用いて、電荷数 8 とした場合の結果を図 8 に示す。この場合、 $E=0.119$ であり、電荷数 6 の場合よりも若干精度が良くなっている。

8. 計 算 量

評価関数を最小にする代用電荷法は従来の方法に比べ、明らかに多くの計算量を必要とする。以下では近似解を得るために必要な時間量をグリーン関数の計算の時間量を基準として議論する。

従来の代用電荷法において、式(2.5)の係数行列を求めるための時間量は、グリーン関数の計算の時間量を c 、電荷の個数を n として、 cn^2 である。近似解の精度を許容量にするために γ 回の計算を行ったすると全体では γcn^2 である。よって従来の代用電荷法の

時間量は、

$$O(n^2) \quad (8.1)$$

である。領域量は係数行列のサイズが $n \times n$ であることから $O(n^2)$ である。

評価関数として R を用いた場合、これを最小にする代用電荷法の計算量を求める。式(5.7)の行列、ベクトルの値を求めるための時間量は、式(5.6)より、拘束点数を m として、それぞれの行列が $(2cm)n^2$ 、ベクトルが cmn である。ただし、グリーン関数の偏導関数の計算の時間量はグリーン関数の計算と等しいとする。解くべき非線形方程式は式(5.11)、(5.12)であるから全体の時間量は、

$$4cm(2n^2+n). \quad (8.2)$$

ホモトピー法の解曲線を追跡するために必要な接線ベクトルを計算するためには、ヤコビ行列の計算が必要である。ヤコビ行列を差分近似により求めるためには、 $2n+1$ 回の式(5.11)、(5.12)の計算が必要であるから、

$$4cm(2n+1)(2n^2+n). \quad (8.3)$$

接線ベクトルにより得られた予測子を解曲線上に収束させるために行うニュートン法においてその反復が γ 回あるとすると、 γ 回のヤコビ行列の計算が必要であるから、

$$\gamma 4cm(2n+1)(2n^2+n). \quad (8.4)$$

以上より、ホモトピー法を用いた場合の評価関数を最小にする代用電荷法の時間量は、

$$O(mn^3) \quad (8.5)$$

である。

領域量は、ニュートン反復でのヤコビ行列のサイズが $(2n+1) \times (2n+1)$ であるから $O(n^2)$ である。

評価関数として E を用いた場合は数値積分の分点数が拘束点の個数と同様に考えられるから、式(8.5)において m を分点数とすればよい。

以上より、評価関数を最小にする代用電荷法と従来の方法の計算量を比較すると、領域量は同程度であるが、時間量は従来法がはるかに小さいことがわかる。

9. む す び

代用電荷法は原理が単純であるため計算効率がよいこと、なめらかな境界の問題に対して比較的計算精度がよいことなどの利点がある反面、電荷配置の問題に対して理論的な裏付けがないため満足できる近似精度を得られるまで電荷の位置を何度も変えて計算する必要があった。

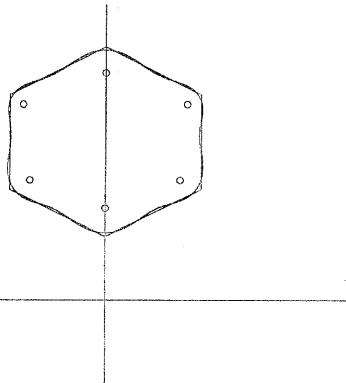


図 7 評価関数 E , 電荷数 6

Fig. 7 Equipotential line of α , $N=6$, where estimating function is E .

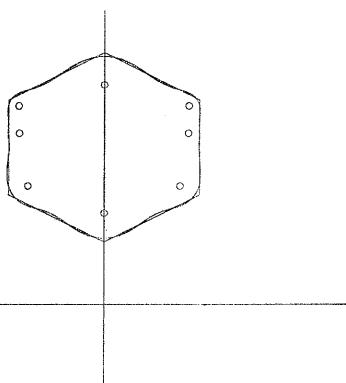


図 8 評価関数 E , 電荷数 8

Fig. 8 Equipotential line of α , $N=8$, where estimating function is E .

本稿では、電荷の最適配置による誤差の低減を目的として、代用電荷法を電荷の位置も解として得られるような最適化問題として定式化した。これにより、試行錯誤によって電荷の位置を決定することなく、常に最適な解を得ることができるようになった。これまで近似精度を上げるために拘束点数（電荷数）を増やす方法が考えられていたが、拘束点数が多いほど精度が良くなるというわけではなく、拘束点も電荷点と同様にその位置が近似解の精度に影響していることを示した。そのため境界が与えられれば、拘束点を選ぶ必要がないような評価関数を設定し、拘束点の位置による誤差の依存性をなくす方法を提案した。

調和関数の性質から代用電荷法の誤差は境界上で最大値を持つことが知られている。従来の方法では与えられた拘束点においてのみ境界条件が満たされており、拘束点以外の境界での誤差について改善する手段がない。これは拘束点数（電荷数）を増やしても本質的には解決できない問題である。この問題を解消する手段として、拘束点を選ぶ必要がない評価関数を最小にする代用電荷法を意味付けることができる。

しかし、本文で提案した方法では最適化問題したことにより、代用電荷法が非線形方程式を解く問題となり、この解法としてホモトピー法を用いたが、計算効率という面からは従来の方法よりも劣ってしまう。

これに対して、問題によっては境界形状の対称性を利用したり、有限領域内のグリーン関数¹⁾を用いることにより変数の数を大幅に低減できる可能性がある。それに伴う評価関数の変化、その偏導関数の計算、また数値計算プログラムの書き換え等、汎用性の面での不利は高速自動微分法²⁾などを用いることによりいくらか緩和できると考える。

また、今回の数値実験例でホモトピー関数の解曲線上に特異点が発生し曲線の追跡が不可能になる場合があった。特に電荷数を多くした場合に顕著に現れる現象であり、非線形方程式の性質によるものと思われる。より一般的な議論を進めるために解明しなければならない問題である。

参考文献

- 1) 村島定行：代用電荷法とその応用、森北出版（1983）。
- 2) 鈴木、鈴木：代用電荷法の最適電荷配置について

- て、信学技報、NLP-90-31, pp. 13-17 (1990).
- 3) 鈴木、井上：境界形状を考慮した代用電荷法、信学論、Vol. J 68-A, No. 9, pp. 812-820 (1985).
- 4) 小島政和：相補性と不動点、産業図書 (1981).
- 5) 山村、堀内：非線形回路解析におけるホモトピー法の収束性について、信学論、Vol. J 70-A, No. 1, pp. 156-159 (1989).
- 6) 鈴木、上野：幾何学的観点による非線形方程式の数値解法、信学論、Vol. J 69-A, No. 1, pp. 9-16 (1986).
- 7) Li, T. Y. and Cong, L.: Solving Eigenvalue Problems of Real Nonsymmetric Matrices with Real Homotopies, *SIAM J. Numer. Anal.*, Vol. 29, No. 1, pp. 229-248 (1992).
- 8) 茨木俊秀：岩波講座応用数学「離散最適化法とアルゴリズム」、岩波書店 (1993).
- 9) 森、室田、杉原：岩波講座応用数学「数値計算の基礎」、岩波書店 (1993).

(平成4年11月24日受付)

(平成5年11月11日採録)



鈴木 智博（正会員）

1966年生。1989年山梨大学工学部電気工学科卒業。1991年同大学院工学研究科修士課程電気工学専攻修了。同年山梨大学工学部電子情報工学科助手、現在に至る。非線形方程式の数値解法の研究に従事。数値解法全般に興味を持つ。電子情報通信学会会員。



鈴木 嘉彦

1947年生。1969年山梨大学工学部電子工学科卒業。1974年東京工業大学大学院研究科博士課程電子工学専攻修了。工学博士。同年山梨大学講師。1989年山梨大学教授。1986年から1年間米国UCLA客員研究員。この間非線形回路網の幾何学的解析、画像処理におけるシステム幾何学的解析法の研究、制御問題を中心とした数値計算法等の研究に従事。現在はこれらの研究のほか、地球規模での環境問題に対するシステム論と情報の果たすべき役割について研究を行っている。電子情報通信学会、IEEE、環境科学会、計測自動制御学会、エンタロピーライフサイエンス学会等各会員。