

代用電荷法によるポアソン方程式の数値計算

森下 博^{†1} 小林 尚弘^{†2} 高市 英明^{†3}
天野 要^{†4} 四ツ谷 晶二^{†5}

代用電荷法はラプラス方程式の簡単で精度の高い近似解法として知られている。しかし、調和関数を基本解の1次結合で近似するという計算法の原理から、一般的にポアソン方程式や非線形方程式には適していないと考えられてきた。本論文では、代用電荷法のポアソン方程式への適用法を提案し、数値実験的にその有効性を検証する。具体的には、ポアソン方程式の解を特解と調和関数の和に分解し、まず前者を基本解を用いて表現し、次に後者を代用電荷法で近似する。ここで、前者の基本解の特異性処理が数値計算上の問題となる。我々は特異点を中心とする極座標を導入してこの特異性を解消する。さらに、変数変換で計算領域を矩形領域に帰着させ、数値積分にはシンプソン則を用いる。その結果、全体として精度の高いポアソン方程式の数値計算法を構成することができる。この計算法は、数値積分に要する計算量は小さくないが、計算の並列化は容易で、領域の変形に対する柔軟性に優れている。ここでは主に2次元ポアソン方程式を扱うが、3次元ポアソン方程式の数値計算法と計算例も記す。

Numerical Computation of Poisson's Equation by the Charge Simulation Method

HIROSHI MORISHITA,^{†1} NAOHIRO KOBAYASHI,^{†2} HIDEAKI TAKAICHI,^{†3}
KANAME AMANO^{†4} and SHOJI YOTSUTANI^{†5}

The charge simulation method is well known as an accurate, rapid solver for Laplace's equation, in which the solution is approximated by a linear combination of logarithmic potentials. However, it has been considered that the method is not suitable for Poisson's equation and nonlinear equations. In this paper, we propose a feasible method for solving the Dirichlet problem of Poisson's equation using the charge simulation method. We first obtain a particular solution by numerically integrating the logarithmic potential, and reduce the problem to Laplace's equation. Then we solve it by the conventional charge simulation method. In the numerical integration, a difficulty appears due to the singularity of logarithmic potential. We overcome the difficulty by introducing the polar coordinate system around the singular point, and adopt Simpson's rule. On the whole, numerical results of high accuracy can be obtained for Poisson's equation. Some examples show the effectiveness of the method. A three-dimensional problem is also described in this paper.

†1 兵庫大学経済情報学部経済情報学科

Department of Economics and Information Science,
Faculty of Economics and Information Science, Hyogo
University

†2 NEC ULSI システム開発研究所

ULSI Systems Development Laboratories, NEC Corporation

†3 株式会社理経大阪支店情報機器営業部システム営業三課

3rd System Sales Section, Information Equipment Sales
Department, Osaka Branch Office, Rikei Corporation

†4 愛媛大学工学部情報工学科

Department of Computer Science, Faculty of Engineering,
Ehime University

†5 龍谷大学理工学部数理情報学科

Department of Applied Mathematics and Informatics,
Faculty of Science and Technology, Ryukoku University

1. はじめに

代用電荷法¹⁾はラプラス方程式の簡単で精度の高い近似解法として知られている。解である調和関数を基本解の1次結合で近似し、電荷と呼ばれる未定係数を境界上の拘束点で境界条件を満たすように定める。この方法は次のような特徴を持っている：(i) 原理とプログラミングが簡単である、(ii) 反復計算や数値積分が不要で、計算量が少ない、(iii) 電荷点と拘束点を適切に配置すれば、高い精度を得ることができる、(iv) 調和関数の最大値の原理が利用できるため、誤差の評価が容易である。実際、代用電荷法は、電気工学におけるポテンシャル解析²⁾や、数値等角写像^{3),4)}のよう

な問題に適用されて、大きな成功を収めている。また、近年、その数学的な研究も急速に進みつつある^{5),6)}。

基本解の重ね合わせという代用電荷法の原理は、ラプラス方程式だけでなく、重調和方程式⁷⁾、ヘルムホルツ方程式、拡散方程式⁸⁾等の代表的な線形方程式にも適用することができる。しかし、その原理から、一般的にはポアソン方程式や非線形方程式には適していないと考えられてきた。この研究の目的はこのような問題に対する代用電荷法の適用の可能性を探ることである。

村島⁹⁾は、ポアソン方程式の解が特解と調和関数に分解できることに着目し、特解が解析的に定まる場合のポアソン方程式に代用電荷法を適用して精度の高い数値解が得られることを示した。また、特解が常微分方程式の数値解として得られる場合にもこの方法を適用できること、特解を得るために偏微分方程式を解かなければならない一般の場合にはその適用性に疑問があることを指摘している。この村島の研究は、1つの特解を精度良く求めることさえできれば、ポアソン方程式の解を特解と調和関数の和に分解する方法が有効であることを示唆するものである。

本論文では、このような視点に立って、一般の場合のポアソン方程式への代用電荷法の適用法を提案し、数値実験的にその有効性を検証する。具体的には、ポアソン方程式の解を特解と調和関数の和に分解し、まず前者を基本解の積分形で表現し、次に後者を代用電荷法で近似する。このような考え方は、熱方程式を解くため、安田¹⁰⁾により試みられているが、特解の数値積分法について検討すべき点が残っていた。それは基本解の特異性処理の問題であった。我々は特異点を中心とする極座標を導入してこの特異性を解消する。さらに、変数変換で計算領域を矩形領域に帰着させ、数値積分にはシンプソン則を用いる。その結果、全体として精度の高いポアソン方程式の数値計算法を構成することができる。この計算法は、数値積分に要する計算量は小さくないが、領域の変形と非斉次項の変化に対する柔軟性に優れている。

ここでは主に2次元ポアソン方程式を扱うが、3次元ポアソン方程式の数値計算法と計算例も記す。

2. 2次元ポアソン方程式の数値計算法

ここでは2次元ポアソン方程式のディリクレ問題

$$\Delta u = f(x, y) \quad ((x, y) \in \Omega), \quad (1)$$

$$u = g(x, y) \quad ((x, y) \in \Gamma) \quad (2)$$

を扱う。ここに、 Ω は (x, y) 平面上の有界領域で、 Γ

はその境界である。この方程式は、電荷分布による静電ポテンシャルや質量分布による重力ポテンシャルの方程式として、応用上も重要である。このとき、右辺を $-(-f(x, y))$ と書いた場合の $-f(x, y)$ が電荷分布や質量分布に相当する。特に、 $f(x, y) \equiv 0$ の場合がラプラス方程式である。

これらの方程式は、それ自身が重要であるだけでなく、与えられた問題の数値解法の一部として繰り返し解かれることもある。以下では、 $f(x, y)$ は $\Omega \cup \Gamma$ 上で適当に定めらるかと仮定する。たとえば、ヘルムホルツ連続であればよい。

2.1 計算法の原理

まず、上記のポアソン方程式の特解として対数ポテンシャル

$$v(x, y) = \frac{1}{2\pi} \iint_{\Omega_1} f(\xi, \eta) \log \sqrt{(\xi - x)^2 + (\eta - y)^2} d\xi d\eta \quad (3)$$

を採用する。ここで、 Ω_1 は Ω を含み $f(x, y)$ がなめらかに定義されている任意の領域である。もちろん $\Omega_1 = \Omega$ でもよい。次に、式(3)で求めた $v(x, y)$ を用いて、ラプラス方程式

$$\Delta w = 0 \quad ((x, y) \in \Omega), \quad (4)$$

$$w = g(x, y) - v(x, y) \quad ((x, y) \in \Gamma) \quad (5)$$

を解く。問題(1)、(2)の解は

$$u(x, y) = v(x, y) + w(x, y) \quad (6)$$

で得られる。

特解 $v(x, y)$ の近似解を数値積分で求め、これを代入したラプラス方程式(4)、(5)の近似解を代用電荷法で求めることにする。

特解 $v(x, y)$ の精度の高い近似解を得るためには、次の2点が問題となる。第1は、被積分関数が対数型の特異点 (x, y) を含むことである。第2は、この特異点 (x, y) が境界 Γ 上またはその近傍にあるときの処理である。たとえば、 $\Omega_1 = \Omega$ で点 (x, y) がなめらかな境界 Γ 上にある場合には、(3)の積分変数 (ξ, η) は点 (x, y) を通る接線の片側半分に制限される。

第1の問題を解決するために、特異点のまわりで極座標を導入する。第2の問題を解決するためには、たとえば $\Omega_1 = \Omega$ の場合、 $(x, y) \in \Omega$ と $(x, y) \in \Gamma$ で別の取扱いをすればよい。しかし、この場合、 (x, y) が領域 Ω 内にあって境界 Γ に十分近いとき、その特異性の影響で、計算精度の落ちる可能性がある。そこで、我々は $f(x, y)$ を Ω を含む半径 R の適当な円領

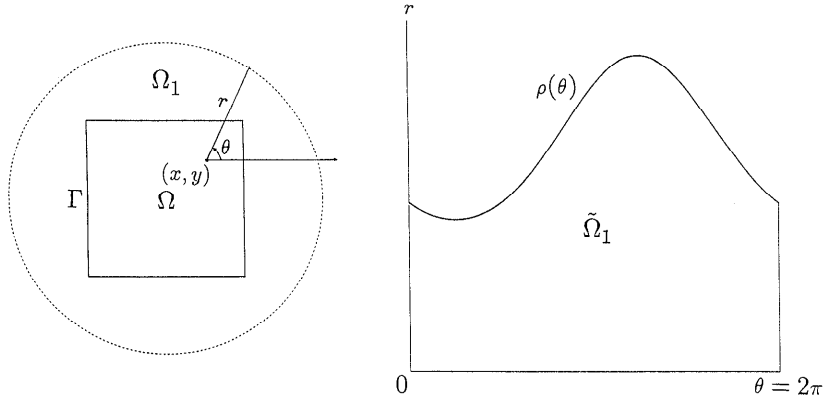


図1 円領域の極座標変換

Fig. 1 Change of a circle domain into the polar coordinate system with the origin at the singular point (x, y) .

域 Ω_1 になめらかに拡張するという方法を採用する。 $f(x, y)$ が解析関数でこのような円領域 Ω_1 に自然に拡張される場合には、それを特解の数値積分に用いることができる。たとえば、 $f(x, y)$ が多項式であれば、これをそのまま適当な Ω_1 で用いることができる。

2.2 特解の数値計算法

特解の対数ポテンシャル (3) の被積分関数は対数型の特異点を含み、このまま簡単な求積法で精度の高い数値解を得ることは困難である。そこで、特異点 (x, y) を中心とする極座標

$$\begin{aligned} \xi &= r \cos \theta + x, \\ \eta &= r \sin \theta + y \end{aligned}$$

を導入し、式 (3) を

$$v(x, y) = \frac{1}{2\pi} \iint_{\tilde{\Omega}_1} f(r \cos \theta + x, r \sin \theta + y) r \log r dr d\theta \tag{7}$$

と変数変換する。ただし、

$$\begin{aligned} \tilde{\Omega}_1 &= \{(r, \theta) : 0 \leq r < \rho(\theta), 0 \leq \theta < 2\pi\}, \\ \rho(\theta) &= -\frac{(x \cos \theta + y \sin \theta) + \sqrt{(x \cos \theta + y \sin \theta)^2 + R^2 - (x^2 + y^2)}}{1} \end{aligned}$$

である。 $\rho(\theta)$ は点 (x, y) を始点とする偏角 θ の半直線の半径 R の円領域 Ω_1 の境界までの距離を表している。変換された領域 $\tilde{\Omega}_1$ は点 (x, y) ごとに形を変える。これを図 1 に示す。さらに変数変換

$$r = \rho(\theta)t, \quad (0 \leq t < 1)$$

を行って、式 (7) を

$$v(x, y) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \rho(\theta)^2 \left\{ \int_0^1 f(\rho(\theta)t \cos \theta + x, \rho(\theta)t \sin \theta + y) t \log(\rho(\theta)t) dt \right\} d\theta \tag{8}$$

と変形し、計算領域を矩形領域 $[0, 1]_t \times [0, 2\pi]_\theta$ に帰着させる。

以上の変数変換の結果、対数ポテンシャル (3) の特異点 (x, y) は矩形領域の $t = 0$ の辺上に写像される。このとき、

$$\lim_{t \rightarrow 0} t \log(\rho(\theta)t) = 0$$

であるから、この辺上の被積分関数の値は 0 と解釈することができる。すなわち、数値積分で精度の低下をもたらす特異性の問題を解消することができる。

この式 (8) の数値積分にはシンプソン則を繰り返し適用する。まず、式 (8) の中括弧の内部

$$g(\theta) = \int_0^1 f(\rho(\theta)t \cos \theta + x, \rho(\theta)t \sin \theta + y) t \log(\rho(\theta)t) dt$$

をシンプソン則で計算する。上記のように、 $t = 0$ では被積分関数の値を 0 と見なす。さらに、この $g(\theta)$ と $\rho(\theta)$ とから、再びシンプソン則を適用して式 (8) の近似解を求める。

安田¹⁰⁾は基本解の重ね合わせという代用電荷法の原理を熱方程式に適用した。そこで、線形楕円型方程式 $(\Delta - k^2)u = f(x, y)$ の特解を基本解の積分形で表現し、特異点近傍ではその特異性を反映した解析解を重ねるという方法を提案している。

表1 特解の計算精度
Table 1 Numerical results of the particular solution $V(x, y)$ for $u = 2x^2 - y^2$ with $M \times M$ intervals, where $v(x, y) = \frac{1}{2}(x^2 + y^2) + 4 \log 2 - 2$.

(x, y)	$M = 100$	$M = 200$	$M = 400$	$M = 800$	$M = 1600$	$M = 3200$	$v(x, y)$
(0, 0)	0.7726503	0.7726041	0.7725925	0.7725896	0.7725889	0.7725887	0.7725887
(0.2, 0.2)	0.8126503	0.8126041	0.8125925	0.8125896	0.8125889	0.8125887	0.8125887
(0.4, 0.4)	0.9326503	0.9326041	0.9325925	0.9325896	0.9325889	0.9325887	0.9325887
(0.6, 0.6)	1.1326503	1.1326041	1.1325925	1.1325896	1.1325889	1.1325887	1.1325887
(0.8, 0.8)	1.4126503	1.4126041	1.4125925	1.4125896	1.4125889	1.4125887	1.4125887
(1, 1)	1.7726503	1.7726041	1.7725925	1.7725896	1.7725889	1.7725887	1.7725887

2.3 調和関数の数値計算法

上記の特解 $v(x, y)$ の数値解 $V(x, y)$ を代入して、ラプラス方程式のディリクレ問題 (4), (5) に代用電荷法¹⁾を適用する。すなわち、ラプラス方程式 (4) の解を問題の領域 Ω の外部に配置された N 個の電荷点 $(\xi_1, \eta_1), (\xi_2, \eta_2), \dots, (\xi_N, \eta_N)$ を極とする対数ポテンシャルの1次結合

$$W(x, y) = \sum_{i=1}^N Q_i \log \{ (x - \xi_i)^2 + (y - \eta_i)^2 \}$$

で近似する。未定係数である電荷 Q_1, Q_2, \dots, Q_N は境界上に配置された N 個の拘束点 $(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_N, y_N)$ 上で境界条件 (5) を満たすように定める。すなわち、 Q_i は拘束条件と呼ばれる連立1次方程式

$$\sum_{i=1}^N Q_i \log \{ (x_j - \xi_i)^2 + (y_j - \eta_i)^2 \} = g(x_j, y_j) - V(x_j, y_j) \quad (j = 1, 2, \dots, N)$$

の解である。

結局、問題のポアソン方程式の近似解は

$$U(x, y) = V(x, y) + W(x, y)$$

で得られる。なお、代用電荷法によるラプラス方程式の解法として、室田⁶⁾のスキーム等を使ってもよい。

2.4 数値実験と考察

以下の数値実験では、原点を中心とする1辺の長さが2の正方形領域

$$\Omega = \{ (x, y) : |x| < 1, |y| < 1 \}$$

の問題を考える。代用電荷法の電荷点の配置は天野¹¹⁾の方法による。

すなわち、まず拘束点 $z_j = x_j + iy_j$ を境界上に配置し、電荷点を

$$\zeta_j = z_j + \frac{1}{2} R_a |z_{j+1} - z_{j-1}| e^{i \{ \arg(z_{j+1} - z_{j-1}) - \pi/2 \}}$$

で配置する。つまり、拘束点 z_j の前後の拘束点 z_{j-1}, z_{j+1} の距離と角度から j 番目の電荷点 ζ_j を求める。 R_a は電荷配置のパラメータで、これを大きくすれば電荷点は境界から離れる。この方法では、領域がなめ

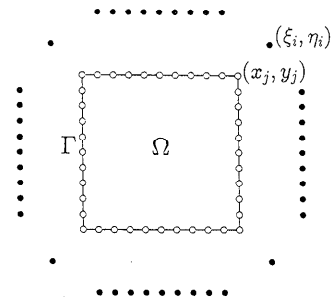


図2 正方形領域の電荷点と拘束点の配置
Fig. 2 Charge points • and collocation points o for a square domain ($N = 40, R_a = 4$).

らかでない場合でも適当な電荷配置を得ることができる。配置の例を図2に示す。

2.4.1 典型的な計算例

まず、典型的な計算例を示す。問題は $f(x, y) = 2, g(x, y) = 2x^2 - y^2$ の場合、すなわち、

$$\begin{aligned} \Delta u &= 2 & ((x, y) \in \Omega), \\ u &= 2x^2 - y^2 & ((x, y) \in \Gamma) \end{aligned}$$

である。真の解は $u = 2x^2 - y^2$ である。積分領域を原点中心で半径 R の円

$$\Omega_1 = \{ (x, y) : x^2 + y^2 \leq R^2 \}$$

としたとき、式 (3) で定義される特解 $v(x, y)$ は

$$v(x, y) = \frac{1}{2}(x^2 + y^2) + R^2 \left(\log R - \frac{1}{2} \right)$$

となる。表1に、 $R = 2$ での近似解 $V(x, y)$ の数値例を示す。変換された矩形領域 $[0, 1]_x \times [0, 2\pi]_y$ を $M \times M$ 分割 ($M = 100, 200, 400, 800, 1600, 3200$) して得られた積分値の計算結果を対角線上の6点で比較した。真の解と比較して、特解の計算結果は分割数を増すごとに精度が良くなり、 $M = 3200$ の場合では小数第7位まで真の解と一致している。

図3(a)に、問題の数値解 $U(x, y)$ を示す。この格子点 (x_i, y_j) 上の計算値を U_{ij} とし、誤差を

$$e_{ij} = |U_{ij} - u_{ij}| = |U(x_i, y_j) - u(x_i, y_j)|$$

で評価してその分布を図3(b)に示す。誤差の最大値は

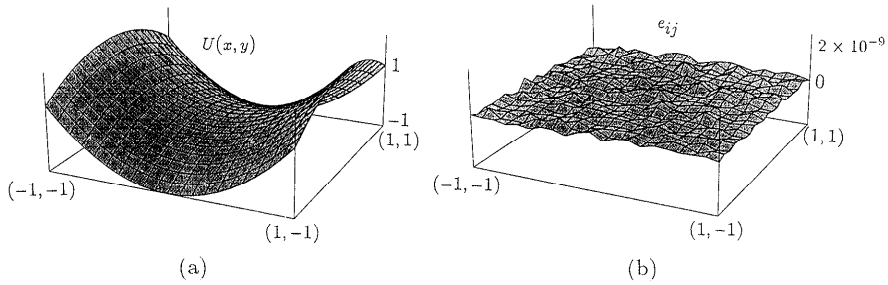


図3 2次元ポアソン方程式の数値解と誤差

Fig. 3 (a) The numerical solution $U(x, y)$ and (b) the error e_{ij} for the two-dimensional Poisson's equation ($u = 2x^2 - y^2$, $R = 2$, $M = 800$, $N = 80$, $R_a = 40$).

$$E_U = \max_{0 \leq i, j \leq m} e_{ij} = 1.2 \times 10^{-10}$$

であり、精度は十分に高いといえる。この例では、 $R = 2$, $M = 800$, $N = 80$, $R_a = 40$, $m = 100$ である。

なお、 $\Omega_1 = \Omega$ とした数値解 $U(x, y)$ の最大誤差は 10^{-5} のオーダーであった。このように、 $\Omega_1 = \Omega$ ではなく、 Ω より広い Ω_1 をとった方が精度は大幅に向上する。

2.4.2 差分法との比較

ここでは、差分法と比較して、提案された方法の性質を調べる。比較の対象となる差分法としては、次のような方法を採用する。まず、問題の正方形領域を幅 $h = 2/m$ の格子で $m \times m$ 分割し、各格子点で $u_{ij} = u(-1+ih, -1+jh)$ ($i, j = 0, 1, \dots, m$) とおいて偏導関数を中心差分で置き換え、ポアソン方程式を

$$u_{i+1j} + u_{ij+1} + u_{i-1j} + u_{ij-1} - 4u_{ij} = h^2 f_{ij} \quad (i, j = 1, 2, \dots, m-1)$$

と5点近似する。その結果、内点における値を未知量とした $(m-1)^2$ 元の連立1次方程式が得られる。通常、このような疎な係数行列を持つ連立1次方程式には反復法が用いられる。しかし、ここでは、係数行列が対称帯行列であることから、修正コレスキー分解法を用いることにする。こうして得られた値は、数値的な誤差がなくても、差分近似にともなう公式誤差のために真の値とは異なる。したがって、その計算結果を \tilde{u}_{ij} で記し、差分法の誤差を

$$E_{FDM} = \max_{0 \leq i, j \leq m} |\tilde{u}_{ij} - u_{ij}| = \max_{0 \leq i, j \leq m} |\tilde{u}_{ij} - u(x_i, y_j)|$$

で評価する。

表2で、解が多項式で与えられる場合の次数を2次から10次まで変えて、両者の計算精度を比較した。こ

表2 差分法との比較

Table 2 Comparison of the numerical errors E_U ($M = 800$, $N = 80$, $m = 100$) and E_{FDM} ($m = 100$); the latter is obtained by the finite difference method.

$u(x, y)$	$f(x, y)$	E_U	E_{FDM}
$x^2 + y^2$	4	1.3×10^{-11}	3.7×10^{-10}
$x^3 + y^3$	$6(x + y)$	3.7×10^{-10}	1.7×10^{-10}
$x^4 + y^4$	$12(x^2 + y^2)$	7.0×10^{-6}	4.7×10^{-4}
$x^5 + y^5$	$20(x^3 + y^3)$	5.7×10^{-6}	3.9×10^{-4}
$x^6 + y^6$	$30(x^4 + y^4)$	1.8×10^{-5}	1.1×10^{-3}
$x^7 + y^7$	$42(x^5 + y^5)$	1.7×10^{-5}	1.1×10^{-3}
$x^8 + y^8$	$56(x^6 + y^6)$	4.2×10^{-5}	1.9×10^{-3}
$x^9 + y^9$	$72(x^7 + y^7)$	3.2×10^{-5}	2.0×10^{-3}
$x^{10} + y^{10}$	$90(x^8 + y^8)$	9.6×10^{-5}	3.1×10^{-3}
$\sin x \cos y$	$-2 \sin x \cos y$	1.0×10^{-7}	3.5×10^{-6}

こには、解が三角関数で与えられる場合も含まれている。一般的に、この中心差分の残差は3次多項式まで0である。表でも、次数の増加とともに、差分法の誤差 E_{FDM} は3次から4次で急激に大きくなっていることが分かる。一方、代用電荷法の誤差 E_U は多項式の次数を上げて急激に大きくなることはない。このように、代用電荷法は関数形の変化に対して安定な計算法であると考えられる。

2.4.3 誤差評価に関する注意

特解 $v(x, y)$ の近似解 $V(x, y)$ を数値積分を用いて求めるために生じる誤差を $\delta_v(x, y)$ とし、 $w(x, y)$ の近似解 $W(x, y)$ を代用電荷法を用いて求める際に生じる誤差を $\delta_w(x, y)$ とする。すなわち

$$\delta_v(x, y) = V(x, y) - v(x, y)$$

であり、

$$\Delta W = 0 \quad ((x, y) \in \Omega),$$

$$W = g - V + \delta_w \quad ((x, y) \in \Gamma)$$

であるとする。このとき、与えられたポアソン方程式の真の解を $u(x, y)$ 、近似解を $U(x, y)$ とすると、

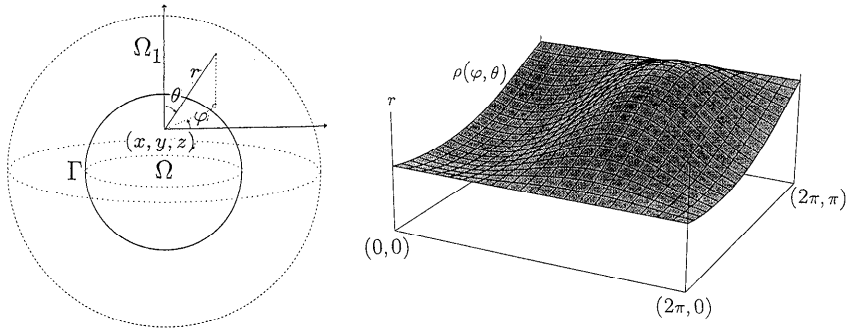


図4 球領域の極座標変換

Fig. 4 Change of a sphere domain into the polar coordinate system with the origin at the singular point (x, y, z) .

$u = v + w, U = V + W$ であるので,
 $\Delta(U - u - \delta_v) = 0 \quad ((x, y) \in \Omega),$
 $U - u - \delta_v = \delta_w - \delta_v \quad ((x, y) \in \Gamma)$

が成り立つ。したがって最大値原理より $|U - u|$ の $\Omega \cup \Gamma$ での最大誤差は、悪くても $2\bar{\delta}_v + \bar{\delta}_w$ である。ただし、 $\bar{\delta}_v, \bar{\delta}_w$ はそれぞれ δ_v, δ_w の最大値である。また δ_v が十分定数に近く、 $\Delta\delta_v$ が十分 0 に近いときは、 $|U - u|$ の最大値は、 $\bar{\delta}_w$ に近いことも分かる。

以上のことから、特解 $V(x, y)$ の数値積分の精度を十分上げておけば、通常の代用電荷法と同程度の精度が期待されることが分かる。

3. 3次元ポアソン方程式の数値計算法

ここでは、3次元ポアソン方程式のディリクレ問題

$\Delta u = f(x, y, z) \quad ((x, y, z) \in \Omega), \quad (9)$

$u = g(x, y, z) \quad ((x, y, z) \in \Gamma) \quad (10)$

の数値計算法を2次元の場合と対比しながら、典型的な計算例を示す。ここに、 Ω は3次元空間内の有界領域、 Γ はその境界面である。

3.1 計算法の原理

まず、上記のポアソン方程式の特解としてニュートンポテンシャル

$$v(x, y, z) = -\frac{1}{4\pi} \iiint_{\Omega_1} \frac{f(\xi, \eta, \zeta)}{\sqrt{(\xi - x)^2 + (\eta - y)^2 + (\zeta - z)^2}} d\xi d\eta d\zeta \quad (11)$$

を採用し、その値を数値積分により求める。積分領域として、2次元の場合と同様に Ω を含む適当な領域 Ω_1 とする。

この積分の特異性も変数変換で解消することができる。次いで、ポアソン方程式の問題を次のようなラプラス方程式の問題

$\Delta w = 0 \quad ((x, y, z) \in \Omega), \quad (12)$

$w = g(x, y, z) - v(x, y, z) \quad ((x, y, z) \in \Gamma) \quad (13)$

に帰着させ、これに3次元の代用電荷法を適用する。問題(9)、(10)の解は

$u(x, y, z) = v(x, y, z) + w(x, y, z) \quad (14)$

で得られる。

3.2 特解の数値計算法

特異点 (x, y, z) を中心とする極座標

$\xi = r \cos \varphi \sin \theta + x,$

$\eta = r \sin \varphi \sin \theta + y,$

$\zeta = r \cos \theta + z$

を導入し、式(11)を

$$v(x, y, z) = -\frac{1}{4\pi} \iiint_{\Omega_1} f(r \cos \varphi \sin \theta + x, r \sin \varphi \sin \theta + y, r \cos \theta + z) \frac{1}{r} r^2 \sin \theta dr d\varphi d\theta$$

と変数変換する。球領域の場合を図4に示す。ここで、 $\rho(\varphi, \theta)$ は特異点 (x, y, z) から (φ, θ) 方向の境界面 Γ までの距離であり、 Ω が変換された領域は

$\tilde{\Omega} = \{(r, \varphi, \theta) : 0 \leq r < \rho(\varphi, \theta), 0 \leq \varphi < 2\pi, 0 \leq \theta < \pi\}$

である。さらに変数変換

$r = \rho(\varphi, \theta)t, \quad (0 \leq t < 1)$

を行って、計算領域を直方体領域に帰着させ、

$$v(x, y, z) = -\frac{1}{4\pi} \int_0^\pi \sin \theta \int_0^{2\pi} \rho(\varphi, \theta)^2 \int_0^1 f(\rho(\varphi, \theta)t \cos \varphi \sin \theta + x, \rho(\varphi, \theta)t \sin \varphi \sin \theta + y, \rho(\varphi, \theta)t \cos \theta + z) t dt d\varphi d\theta \quad (15)$$

を得る。

以上の変数変換の結果、ニュートンポテンシャル(11)の特異点 (x, y, z) は直方体領域の $t = 0$ の面上に写

像され、数値積分の特異性の問題が解消される。数値積分には、2次元の場合と同様に、シンプソン則を適用することができる。

3.3 調和関数の数値計算法

上記の特解 $v(x, y, z)$ の数値解 $V(x, y, z)$ を代入して、ラプラス方程式のディリクレ問題 (12), (13) に代用電荷法を適用する。すなわち、ラプラス方程式 (12) の解を問題の領域 Ω の外部に配置された N 個の電荷点 (ξ_i, η_i, ζ_i) ($i = 1, 2, \dots, N$) を極とするニュートンポテンシャルの1次結合

$$W(x, y, z) = \sum_{i=1}^N Q_i \frac{1}{\sqrt{(x - \xi_i)^2 + (y - \eta_i)^2 + (z - \zeta_i)^2}}$$

で近似する。未定係数である電荷 Q_i は境界面上に配置された N 個の拘束点 (x_j, y_j, z_j) ($j = 1, 2, \dots, N$) 上で境界条件 (13) を満たすように定める。すなわち、 Q_i は連立1次方程式

$$\sum_{i=1}^N Q_i \frac{1}{\sqrt{(x_j - \xi_i)^2 + (y_j - \eta_i)^2 + (z_j - \zeta_i)^2}} = g(x_j, y_j, z_j) - V(x_j, y_j, z_j) \quad (j = 1, 2, \dots, N)$$

の解である。ポアソン方程式の近似解は

$$U(x, y, z) = V(x, y, z) + W(x, y, z)$$

で得られる。

3.4 数値実験と考察

3次元空間内の単位球領域

$$\Omega = \left\{ (x, y, z) : \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} < 1 \right\}$$

におけるディリクレ問題

$$\Delta u = n(n-1)(x^{n-2} + y^{n-2} + z^{n-2}) \quad ((x, y, z) \in \Omega),$$

$$u = x^n + y^n + z^n \quad ((x, y, z) \in \Gamma) \quad (n = 2, 3, \dots, 10)$$

を考える。真の解は $u = x^n + y^n + z^n$ である。積分領域を原点中心で半径 R の球

$$\Omega_1 = \{(x, y, z) : x^2 + y^2 + z^2 \leq R^2\}$$

としたとき、(11) で定義される特解 $v(x, y, z)$ は、 $n = 2$ の場合、

$$v(x, y, z) = x^2 + y^2 + z^2 - 3R^2$$

となる。問題は球対称で、解も $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$ のみに依存している。電荷点と拘束点は

$$(\xi_{ij}, \eta_{ij}, \zeta_{ij}) = (R_a \cos \varphi_i \sin \theta_j, R_a \sin \varphi_i \sin \theta_j, R_a \cos \theta_j),$$

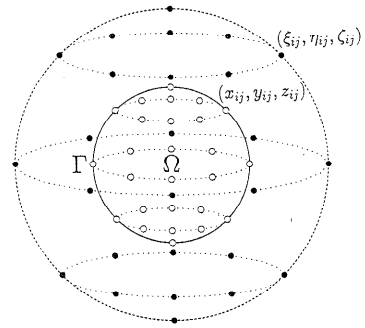


図5 球領域の電荷点と拘束点の配置
Fig. 5 Charge points ● and collocation points ○ for the sphere domain ($N_\varphi = 8, N_\theta = 4, R_a = 2$).

$$(x_{ij}, y_{ij}, z_{ij}) = (\cos \varphi_i \sin \theta_j, \sin \varphi_i \sin \theta_j, \cos \theta_j),$$

$$\varphi_i = \frac{2(i-1)\pi}{N_\varphi} \quad (i = 1, 2, \dots, N_\varphi),$$

$$\theta_j = \frac{(j-1)\pi}{N_\theta} \quad (j = 1, 2, \dots, N_\theta + 1)$$

と配置する。したがって、電荷の総数は $N = N_\varphi(N_\theta - 1) + 2$ である。配置の例を図5に示す。特解 (15) の計算では、 $R = 5$ とし、変数変換された直方体領域 $[0, 1]_x \times [0, 2\pi]_\varphi \times [0, \pi]_\theta$ を $M \times M \times M = 400 \times 400 \times 400$ 分割し、数値積分には2次元の場合と同様なシンプソン則を採用する。代用電荷法の電荷数は $N_\varphi = 20, N_\theta = 10$ すなわち $N = 182$ である。また $R_a = 5$ である。

図6(a)に、問題の多項式の次数 n の値を変化させた場合の $\varphi = \theta = 0$ の方向の数値解 $U(r)$ を示す。誤差を

$$e_r = |U(r) - u(r)|$$

で評価をして、その分布を図6(b)に、その最大値

$$E_U = \max_{0 \leq r \leq 1} e_r$$

を表3に示す。次数 n の増加とともに計算精度はほぼ単調に低下するが、 $n \leq 7$ の範囲では単精度計算における丸め誤差程度以上の計算精度が得られている。

4. おわりに

代用電荷法によるポアソン方程式の数値計算法を提案し、数値実験的にその有効性を検証した。この方法の原理は、解を特解と調和関数の和に分解し、前者を基本解を用いて表現し、後者を代用電荷法で近似するというものである。我々は、前者の特解の数値積分に変数変換を行って特異性の問題を解消し、全体として精度の高いポアソン方程式の計算法を構成することが

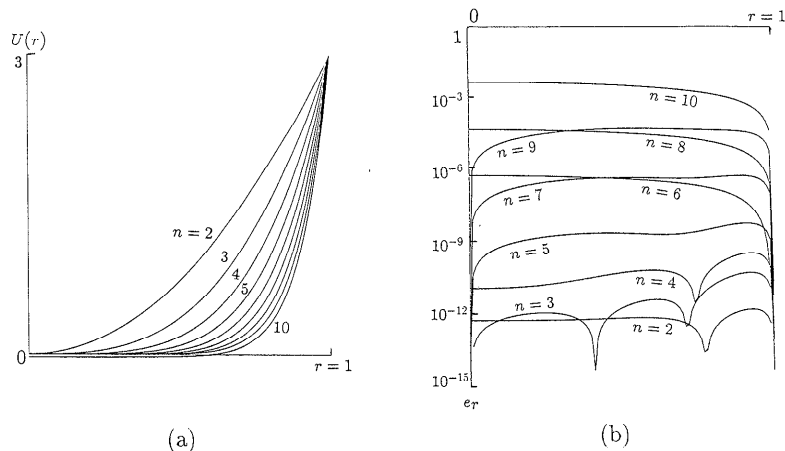


図6 3次元ポアソン方程式の数値解と誤差

Fig. 6 (a) The numerical solution $U(r)$ and (b) the error $E_U(r)$ for the three dimensional Poisson's equation ($R = R_a = 5$, $M = 100$, $N_\varphi = 20$, $N_\theta = 10$, $\varphi = \theta = 0$).

表3 3次元ポアソン方程式の計算精度

Table 3 Numerical error for the three dimensional Poisson's equation ($R = 5$, $M = 400$, $N_\varphi = 20$, $N_\theta = 10$, $\varphi = \theta = 0$).

$u(x, y, z)$	$f(x, y, z)$	E_U
$x^2 + y^2 + z^2$	6	6.5×10^{-11}
$x^3 + y^3 + z^3$	$6(x + y + z)$	1.4×10^{-9}
$x^4 + y^4 + z^4$	$12(x^2 + y^2 + z^2)$	6.8×10^{-9}
$x^5 + y^5 + z^5$	$20(x^3 + y^3 + z^3)$	7.8×10^{-9}
$x^6 + y^6 + z^6$	$30(x^4 + y^4 + z^4)$	3.8×10^{-6}
$x^7 + y^7 + z^7$	$42(x^5 + y^5 + z^5)$	4.0×10^{-6}
$x^8 + y^8 + z^8$	$56(x^6 + y^6 + z^6)$	1.9×10^{-4}
$x^9 + y^9 + z^9$	$72(x^7 + y^7 + z^7)$	2.1×10^{-4}
$x^{10} + y^{10} + z^{10}$	$90(x^8 + y^8 + z^8)$	9.5×10^{-3}

できた。このとき、特解の精度を上げるために、右辺の密度関数を問題の領域を含む適当な円領域になめらかに拡張するという方法が有効である。また、この方法は2次元問題だけでなく3次元問題にも比較的容易に適用することが可能である。

この方法の最大の問題は特解の数値積分に要する計算量が小さくないことである。実際、Sun Ultra 1 Model 170 (167 MHz) で、2次元問題の $V(x, y)$ の積分に要した計算時間は領域を $M \times M = 800 \times 800$ 分割して (x, y) 1点あたり5秒から10秒、3次元問題の $V(x, y, z)$ の積分に要した計算時間は領域を $M \times M \times M = 400 \times 400 \times 400$ 分割して (x, y, z) 1点あたり10分から20分であった。特解の数値積分法の高速度は今後の重要な研究課題である。なお、特解を各点ごとに独立に計算できるので、並列計算機との相性は非常に良い。

このポアソン方程式の数値計算法の大きな特徴の1

つは領域の変形に対する柔軟性である。このような特徴を生かして、非線形方程式の解の領域の形に対する依存性を解析することも、本研究の直接の動機であると同時に、今後の研究課題である。

謝辞 差分法の計算結果について有益なコメントをくださった東京大学の菊地文雄教授に感謝します。また、原稿の作成を手伝ってくださった龍谷大学大学院生山本直規氏と愛媛大学大学院生土江雅之氏に感謝します。

参考文献

- 1) 村島定行：代用電荷法とその応用，森北出版，東京(1983)。
- 2) Singer, H., Steinbigler, H. and Weiss, P.: A Charge Simulation Method for the Calculation of High Voltage Fields, *IEEE Trans. Power Apparatus Systems*, Vol.PAS-93, No.5, pp.1660-1668 (1974)。
- 3) Amano, K.: A Charge Simulation Method for the Numerical Conformal Mapping of Interior, Exterior and Doubly-connected Domains, *J. Comput. Appl. Math.*, Vol.53, No.3, pp.353-370 (1994)。
- 4) 天野 要：円弧スリット領域への数値等角写像の方法，情報処理学会論文誌，Vol.36, No.2, pp.219-225 (1995)。
- 5) 岡本 久，桂田祐史：ポテンシャル問題の高速解法，*応用数理*，Vol.2, No.3, pp.2-20 (1992)。
- 6) 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，Vol.34, No.3, pp.533-535 (1993)。
- 7) 村島定行：2次元弾性論への代用電荷法の応用に

ついて、電子通信学会論文誌, Vol.J65-A, No.10, pp.1033-1034 (1982).

- 8) 野中善政, 村島定行: グリーン関数の重ね合わせ法による拡散方程式の近似解法, 情報処理学会論文誌, Vol.23, No.3, pp.288-295 (1982).
- 9) 村島定行: 代用電荷法のポアソン方程式への応用, 静電気学会誌, Vol.4, No.1, pp.38-43 (1980).
- 10) 安田敏彦: 代用電荷法による熱方程式の解法, 大阪市立大学修士論文 (1990).
- 11) 天野 要: 代用電荷法に基づく数値等角写像の誤差の性質, 情報処理学会論文誌, Vol.32, No.1, pp.1-10 (1991).

(平成9年3月14日受付)

(平成9年6月3日採録)



森下 博 (正会員)

1970年生。1993年龍谷大学理工学部数理情報学科卒業。1995年龍谷大学大学院理工学研究科修士課程数理情報学専攻修了。修士(理学)。

現在、兵庫大学経済情報学部経済情報学科助手。研究分野は非線形偏微分方程式と数値解析。日本数学会、日本応用数学会各会員。



小林 尚弘

1970年生。1993年龍谷大学理工学部数理情報学科卒業。1995年龍谷大学大学院理工学研究科修士課程数理情報学専攻修了。修士(理学)。

現在、NEC ULSI システム開発研究所勤務。日本応用数学会会員。



高市 英明

1972年生。1994年龍谷大学理工学部数理情報学科卒業。1996年龍谷大学大学院理工学研究科修士課程数理情報学専攻修了。修士(理学)。

現在、(株)理経大阪支店情報機器営業部システム営業三課勤務。日本応用数学会会員。



天野 要 (正会員)

1948年生。1971年京都大学工学部電子工学科卒業。1978年北海道大学大学院工学研究科博士課程電気工学専攻修了。工学博士。現在、愛媛大学工学部情報工学科教授。研究分野は数値解析と数理情報科学。情報処理学会創立30周年記念論文賞、日本応用数学会1996年度論文賞受賞。日本数学会、日本応用数学会、電子情報通信学会、日本心理学会、ACM各会員。



四ツ谷 晶二

1950年生。1974年大阪大学理学部数学科卒業。1979年大阪大学大学院理学研究科博士課程数学専攻単位修得退学。理学博士。現在、龍谷大学理工学部数理情報学科教授。研究分野は非線形偏微分方程式と数値解析。日本数学会、日本応用数学会、日本混相流学会各会員。