

局所 RBF 選点法のポアソン方程式の解析への適用

APPLICATION OF LOCALIZED RBF COLLOCATION METHOD TO SOLUTION OF POISSON'S EQUATION

内藤 孝広¹⁾, 松本 敏郎²⁾, 神谷 恵輔³⁾

Takahiro NAITO, Toshiro MATSUMOTO, Keisuke KAMIYA

- 1) 名古屋大学工学研究科機械理工学専攻 (〒464-8603 名古屋市千種区不老町, E-mail: t.naito@nuem.nagoya-u.ac.jp)
 2) 名古屋大学工学研究科機械理工学専攻 (〒464-8603 名古屋市千種区不老町, E-mail: t.matsumoto@nuem.nagoya-u.ac.jp)
 3) 名古屋大学工学研究科機械理工学専攻 (〒464-8603 名古屋市千種区不老町, E-mail: kamiya@nuem.nagoya-u.ac.jp)

A collocation method using RBF-based approximation is applied to analyses of Poisson's equation. The solution is approximated with a linear combination of radial basis functions (RBFs) at several collocation points inside a local region of the domain. The unknown coefficients are determined such that the approximate solution satisfies the governing differential equation for the internal representative point or the boundary condition for the boundary representative point, and the approximate values of the solutions for the previous iterative step at other collocation points in the local region. The computation repeated iteratively until the solution converges. The effectiveness of the present approach is demonstrated through some simple numerical examples.

Key Words: Numerical Method, Collocation Method, Radial Basis Function, Localized Approximation, Multiquadrics

1. はじめに

Kansa⁽¹⁾ によって提案された RBF (Radial Basis Function) を用いた選点法は、問題の未知関数を RBF の線形結合により近似し、領域内部で支配微分方程式を満足し、境界上で境界条件を満足するように未知係数を決定することにより、近似解を得る方法である。この方法は、未知係数に対する連立一次方程式が容易に得られる簡便な方法であるが、係数行列が非対称密行列であり、大規模な問題になると係数行列が悪条件になる。

これに対して、Fasshauer⁽²⁾ は RBF を用いた Hermite 補間により、係数行列が対称となる選点法を提案して効率化を図っているが、いずれの方法も記憶容量が選点数の 2 乗に比例して大きくなり、大規模な問題においては解析効率が悪くなる。これに対して、近似関数に RBF を用いるものの、選点法を局所領域に存在する選点に対してのみ適用し、反復計算により解を得る局所 RBF 選点法⁽³⁾ が提案されている。

本研究では、この方法を拡張して 2 次元の Poisson 方程式の解析に適用する場合の定式化を示し、RBF として Multiquadric を用いた場合の数値解析例について検討する。

2. 定式化

2.1. Kansa の方法

局所 RBF 選点法は、基本的には Kansa の方法⁽¹⁾ を局所領域の選点について適用する方法である。したがって、まず Kansa の方法について示しておく。

支配微分方程式は、次の Poisson 方程式を考える。

$$\nabla^2 u(x) = g(x), \quad x \in \Omega \quad (1)$$

$u(x)$ は点 x におけるポテンシャル、 $g(x)$ はソース項、 Ω は領域を表す。

境界条件は、次のようになる。

$$u(x) = \bar{u}(x), \quad x \in \Gamma_u \quad (2)$$

$$q(x) = \frac{\partial u(x)}{\partial n(x)} = \bar{q}(x), \quad x \in \Gamma_q \quad (3)$$

ただし、 $\partial/\partial n(x)$ は境界の外向き放線方向の勾配を表すものとする。

境界と領域にそれぞれ N 個と L 個の選点を置く。このとき、領域中のある選点 x におけるポテンシャル u を、次のように補間する。

$$u(x) = \sum_{k=1}^{L+N} \alpha_k F(|x - x_k|) = \{F\}^T \{\alpha\} \quad (4)$$

ここで x_k は各選点に番号を振ったものである。 F は近似関数である。

Kansa の方法では、内部選点 x に対しては、近似式 (4) は支配方程式 (1) を満たすものとする。内部選点の個数を N_I とすると、これより以下の一連の式が得られる。

$$\begin{cases} \alpha_1 \nabla^2 F_{1,1} + \dots + \alpha_{L+N} \nabla^2 F_{1,L+N} = b_1 \\ \vdots \\ \alpha_1 \nabla^2 F_{L,1} + \dots + \alpha_{L+N} \nabla^2 F_{L,L+N} = b_L \end{cases} \quad (5)$$

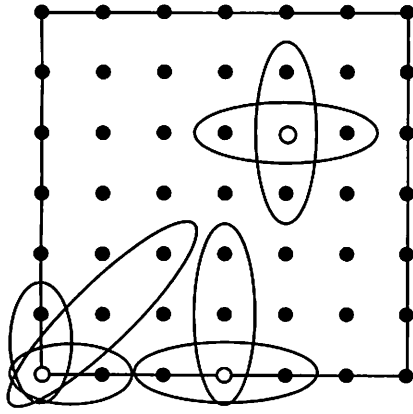


Fig. 1 Local collocation points for 2D problems.

ただし, $\nabla^2 F_{i,j} = \nabla^2 F(x_i - x_j)$, $b_i = b(x_i)$ のように定義した.

次に, 境界の選点 x に対しては, Dirichlet 型境界条件を満たす点が M 個, Neumann 型境界条件を満たす点が $N - M$ 個あるとすると, 次の式が得られる.

$$\begin{cases} \alpha_1 F_{L+1,1} + \dots + \alpha_{L+N} F_{L+1,L+N} = \bar{u}_{L+1} \\ \vdots \\ \alpha_1 F_{L+M,1} + \dots + \alpha_{L+N} F_{L+M,L+N} = \bar{u}_{L+M} \\ \alpha_1 G_{L+M+1,1} + \dots + \alpha_{L+N} G_{L+M+1,L+N} = \bar{q}_{L+M+1} \\ \vdots \\ \alpha_1 G_{L+N,1} + \dots + \alpha_{L+N} G_{L+N,L+N} = \bar{q}_{L+N} \end{cases} \quad (6)$$

ただし, $\bar{u}_i = \bar{u}(x_i)$, $G_{i,j} = \frac{\partial F}{\partial n}(x_i, x_j)$, $q_i = \bar{q}(x_i)$ のような意味で用いている. 式 (5) と式 (6) をまとめると, 次のような $N + L$ 元連立方程式となる.

$$[A] \{\alpha\} = \{B\} \quad (7)$$

式 (7) を解けば未知係数 $\{\alpha\}$ が得られる. さらに任意の点 x のポテンシャルは, 式 (4) から計算することができる. 上記のことから分かるように, Kansa の方法における連立方程式の係数行列が非対称密行列であり, 大規模な問題になると係数行列が悪条件になってしまうことが指摘されている⁽¹⁾.

2.2. 局所 RBF 選点法

次に, Poisson 方程式に対する局所 RBF 選点法の定式化を示す. 局所 RBF 選点法では, 局所領域の選点を Fig.1 に示すようにとる. 図の白丸 (○) が, 局所領域で着目している選点である. 着目選点 x におけるポテンシャル u を, 次のように補間する.

$$u(x) = \sum_{k=1}^n \alpha_k F(|x - x_k|) = \{F\}^T \{\alpha\} \quad (8)$$

ここで n は局所領域内の選点数, x_k は局所領域内で注目している選点である. また f は近似関数であり, 本研究では RBF として次の Multiquadric を用いた.

$$F(|x - x_i|) = \sqrt{1 + \frac{|x - x_i|^2}{c^2}} \quad (9)$$

ただし, c は F の形をコントロールするパラメータである. c が小さいときは, F は x_i の近傍でより尖った形となる. 局所 RBF 選点法では, 考えている選点の内点の場合と境界上の点の場合について異なる連立方程式を考えて, 繰り返し計算により解を求める.

$k-1$ 回の繰り返し計算により得られている近似解を u^{k-1} , そのときの局所領域の近似係数を α_i^{k-1} , ($i = 1, \dots, n$) とする. k ステップ目の計算で用いる式を以下に示す.

まず, 着目する選点が領域内部の点のときは, 局所領域内の全ての選点で近似式 (8) は支配方程式 (1) を満足するとともに, ステップ $k-1$ のポテンシャル値を満たすものとする. すなわち,

$$\begin{bmatrix} \nabla^2 F_{1,1} & \dots & \nabla^2 F_{1,n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \nabla^2 F_{n,1} & \dots & \nabla^2 F_{n,n} \\ F_{1,1} & \dots & F_{1,n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ F_{n,1} & \dots & F_{n,n} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \alpha_1^k \\ \vdots \\ \alpha_n^k \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_1 \\ u_1^{k-1} \\ \vdots \\ u_n^{k-1} \end{Bmatrix} \quad (10)$$

点 x が境界上の点 x_1 にあり, Dirichlet 型境界条件が課されている場合には次式を用いる.

$$\begin{bmatrix} F_{1,1} & \dots & F_{1,n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ F_{n,1} & \dots & F_{n,n} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \alpha_1^k \\ \vdots \\ \alpha_n^k \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \bar{u}_1 \\ u_2^{k-1} \\ \vdots \\ u_n^{k-1} \end{Bmatrix} \quad (11)$$

点 x が境界上の点 x_1 にあり, Neumann 型境界条件が課されている場合には次式を用いる.

$$\begin{bmatrix} G_{1,1} & \dots & G_{1,n} \\ F_{1,1} & \dots & F_{1,n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ F_{n,1} & \dots & F_{n,n} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \alpha_1^k \\ \vdots \\ \alpha_n^k \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \bar{q}_1 \\ u_1^{k-1} \\ \vdots \\ u_n^{k-1} \end{Bmatrix} \quad (12)$$

式 (10)~(12) は, 次のように簡潔に書ける.

$$[C] \{\alpha^k\} = \{D^{k-1}\} \quad (13)$$

式 (10) と (12) の左辺の係数行列は行の方が大きな行列である. よって, これらの解は次の形に最小二乗解として得られる.

$$\{\alpha^k\} = ([C]^T [C])^{-1} [C]^T \{D^{k-1}\} \quad (14)$$

式 (14) のマトリックス $([C]^T [C])^{-1}$ は, たとえば Fig.1 の場合には 5×5 の小行列であり, あらかじめ陽に求めておけば, 式 (14) の計算は極めて高速に実行できる. 式 (14) を式 (8) に代入すると, Dirichlet 型境界条件が課されている選点以外の各選点のポテンシャルの更新公式が, 次のように得られる.

$$\begin{aligned} u_i^k &= \{F_i\}^T \{\alpha\} \\ &= \{F_i\}^T ([C]^T [C])^{-1} [C]^T \{D^{k-1}\} \\ &= \{E\}^T \{D^{k-1}\} \end{aligned} \quad (15)$$

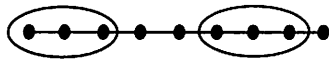


Fig.2 Local collocation points for 1D problem.

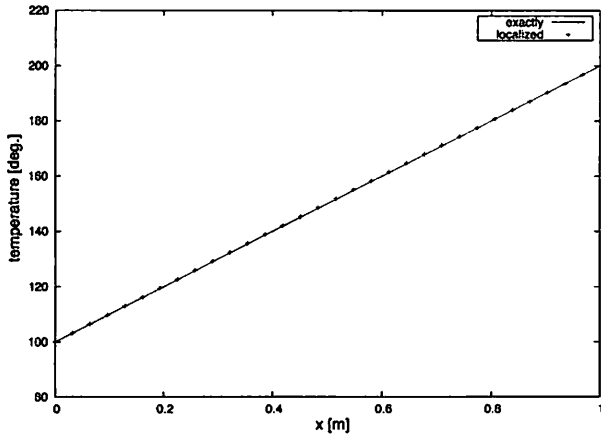


Fig.3 Results for 1D example.

ただし,

$$\{E\}^T = \{F_i\}^T ([C]^T [C])^{-1} [C]^T \quad (16)$$

であり, $\{E\}$ は $\{D^{k-1}\}$ の行数と同じ行数からなるベクトルである。また, $\{E\}$ は計算ステップに依存しないのであらかじめ計算して記憶しておく。記憶容量は選点数に比例する。Fig.1 の場合は, 内部選点に対して $10L$ 個, Dirichlet 型境界条件が課されている選点以外の選点の総数 $N - M$ に対して, $6(N - M)$ 個となる。

計算は, u^k に初期値を仮定し, すべての選点に対して, 選点が内点のときには式 (10), 境界上の点のときには式 (11) または (12) に基づく更新公式を用いて u^k を更新する。この計算をポテンシャル u^k が十分収束するまで繰り返し, 次式が満たされたら計算を打ち切るものとする。

$$\frac{\|u^k - u^{k-1}\|}{\|u^k\|} \leq \epsilon \quad (17)$$

ここでは, $\epsilon = 1.0 \times 10^{-6}$ とした。

以上のように本解析法では, Kansa の方法のように連立方程式を一度に解く代わりに反復計算により解を求めることになり, このままでは計算時間においては必ずしも有利ではないと考えられる。そのため, 何らかの計算を加速する方法を取り入れていく必要がある。

3. 数値計算例

3.1. 1次元問題に対する計算例

長さ 1.0 の区間を考える。 $x = 0.0$ においては $u = 100$, $x = 1.0$ においては $u = 200$, また簡単のためソース項は $g(x) = 0$ とし, この区間に 20 個の選点を等間隔に配置した。 Fig.2 にこの区間に対する局所領域の選点のとり方を示す。

このモデルに対して解析により得られた u を Fig.3 に示す。 RBF のパラメータは $c = 5.0$ とした。 Fig.3 から, 厳密解に非

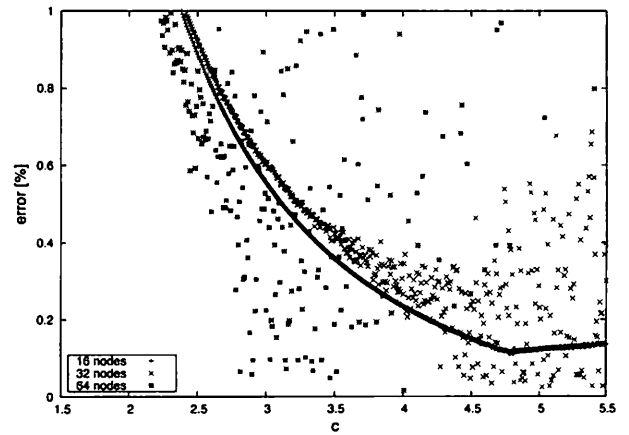


Fig.4 Relation between values of multiquadrics' parameter and solution errors for 1D example.

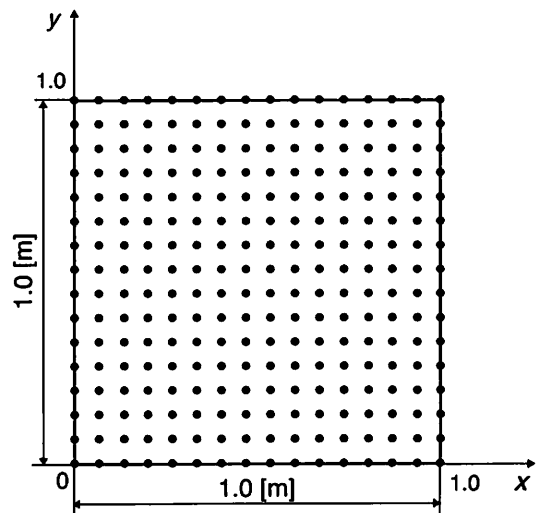


Fig.5 Arrangement of collocation points for 2D example model.

常によく一致した精度の良い結果が得られていることが分かる。

次に RBF のパラメータ c と誤差の関係を選点数を変化させて調べた。その結果を Fig.4 に示す。 Fig.4 を見ると, c として, 区間長の 3 倍以上の値を与えているとき概ね精度良い解が得られているが, 選点数が 16 点および 32 点の場合と 64 点の場合において, 誤差が小さくなるパラメータ c の値の範囲が異なっていることが確認できる。選点数が変化すると, 誤差を小さくするパラメータ c の値も変化すると言える。

3.2. 2次元問題に対する計算例

Fig.5 に示すような一辺が 1.0 [m] の正方領域に対する定常熱伝導問題を考える。境界条件は, $y = 0.0$ [m] においては $u = 100$ [°C], $y = 1.0$ [m] においては $u = 200$ [°C] であり, $x = 0.0, 1.0$ [m] においては断熱境界条件が課されているものとする。この例題の場合もソース項は $g(x) = 0$ とした。また, 選点数は 256 点とし, 格子状に等間隔に配置した。

Fig.5 のモデルに対して解析により得られた $x = 0.4375$ [m] の温度を Fig.6 に示す。 RBF のパラメータは $c = 1.5$ とした。

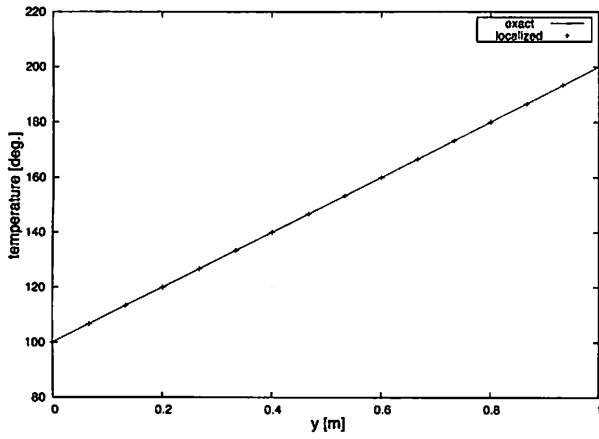


Fig.6 Results for temperature of 2D example.

Fig.6に y 軸に沿った温度分布の結果を示す。1次元問題の場合と同様、厳密解によく一致した精度の良い結果が得られた。計算には、Intel Pentium 4, 2.66GHzのCPUのPCを使用し、計算時間は0.28125秒であった。これに対して、同じ問題を同じ選点数についてKansaの方法で解いた場合の計算時間は0.03125秒であった。

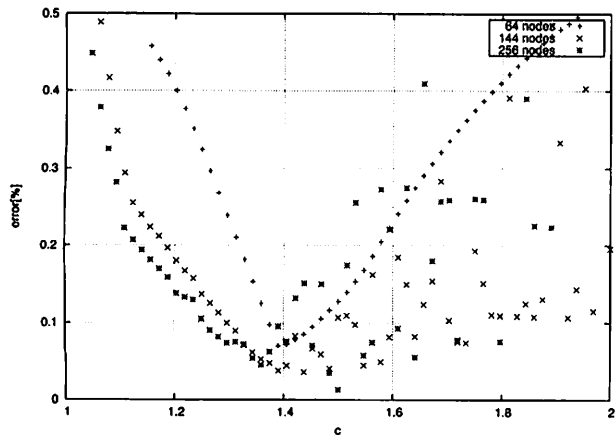


Fig.7 Relation between multiquadrics' parameter and solution error for 2D example.

また、RBFのパラメータ c と誤差の関係も調べた。Fig.5のモデルを用いて、選点数を変化させた。その結果をFig.7に示す。Fig.7を見ると、パラメータ c の増加に対して、 c を解析領域の大きさ1.4程度にしたときに誤差が特に小さくなっていることがわかる。

最後に、本研究で用いた局所RBF選点法の結果をKansaの方法⁽¹⁾およびFasshauerの方法⁽²⁾による結果と比較した。Fig.5のモデルを用いて、選点数とパラメータ c の関係を調べた結果をFig.8に示す。Fig.8を見ると、局所RBF選点法はパラメータ c の値が1から1.5の間で誤差が小さくなり、その後パラメータ c の値が大きくなると誤差が再び大きくなっていることが確認できる。これに対して、Kansaの方法はパラメータ c の値が増加するとともに誤差が急激に小さくなり再び大きくなることはないことが確認できる。局所RBF選

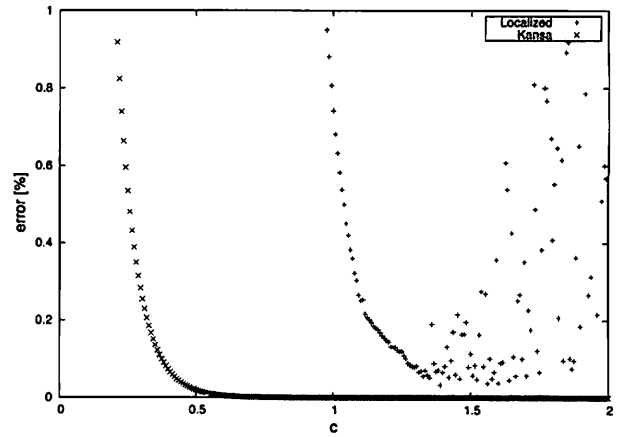


Fig.8 Comparison of errors of present solutions with those obtained by Kansa's collocation method.

点法はKansaの方法に比べてパラメータ c の値に依存していることが観察される。

4. 結言

本論文では局所領域の選点に対してRBFの線形結合を用いて解を近似する局所RBF選点法をPoisson方程式の解析に適用する場合の定式化と、RBFとしてMultiquadricsを用いた場合の数値解析例を示した。簡単な熱伝導問題について数値解析例から、精度良い解析が可能であるものの、選点の総数とRBFのパラメータの値とが解の精度に影響を与えることが観察された。今後、他のRBFを用いた場合、局所領域の取り方、RBFのパラメータの影響を受けないスキーム、解の収束性、3次元問題の解析等検討する必要がある。

参考文献

- (1) Kansa, E.J. : Multiquadrics - a scattered data approximation scheme with applications to computational fluid dynamics: I. Surface approximations and partial derivative estimates, *Comput. Math. Appl.*, **19**, (1990), pp. 127-145.
- (2) Fasshauer, G.E. : Solving partial differential equations by collocation with radial basis functions, *Surface Fitting and Multiresolution Methods*, A. Le Mehaute, C. Rabut, and L.L. Schumaker (eds.), Vanderbilt University Press, (1997), pp. 131-138.
- (3) Divo, E. and Kassab, A.J. : Modeling of convective and conjugate heat transfer by a third order localized RBF meshless collocation method, *Numerical Heat Transfer*, pp. 357-370.
- (4) Rocca, A.La, Hernandez, A. and Power, H. : Radial basis function Hermite collocation approach for the solution of time dependent convection-diffusion problems, *Engineering Analysis with Boundary Elements*, **29**, (2005), pp. 359-370.