システム数理IV 第12回

牧野淳一郎

1999 年 7 月 4 日

1 ハミルトン系とそのための解法 :つづき

前回にひきつづいてハミルトン系向けの解法について考える。

2 リープフロッグ公式

ハミルトン系のシミュレーションの例には例えば以下のようなものがある

- プラズマシミュレーション
- (古典) 分子動力学
- 銀河動力学

これらはいずれも、古典的な多体問題として定式化される。プラズマの場合は磁場も入るのでちょっと面倒だが、それを無視すれば運動方程式が

$$m_i \frac{d^2 \boldsymbol{x}_i}{dt^2} = \sum_{j \neq i} \boldsymbol{f}_{ij} \tag{1}$$

つまり、ある粒子 i の加速度は他のすべての粒子からの力の合計ということになる。もちろん、古典力学系は他にもいろいろあるが、基本的なアプローチは似たようなものである。

このような問題に対して、もっとも普通に使われる公式は以下の leapfrog といわれるものである。

$$v_{i+1/2} = v_{i-1/2} + \Delta t a(x_i) \tag{2}$$

$$x_{i+1} = x_i + \Delta t v_{i+1/2} \tag{3}$$

これでは速度と位置がずれた時間でしか定義されないが、出発用公式として

$$v_{1/2} = v + \Delta t a(x_0)/2 \tag{4}$$

を使い、さらに終了用公式として

$$v_i = v_{i-1/2} + \Delta t a(x_i)/2 \tag{5}$$

を使うことで最初と最後を合わせることが出来る。この形は、実は

$$x_{i+1} = x_i + \Delta t v_i + \Delta t^2 a(x_i)/2 \quad (6)$$

$$v_{i+1} = v_i + \Delta t[a(x_i) + a(x_{i+1})]/2 \quad (7)$$

と数学的に等価である (証明してみること) また、以下のようにも書ける

$$v_{i+1/2} = v_i + \Delta t a(x_i)/2 \quad (8)$$

$$x_{i+1} = x_i + \Delta t v_{i+1/2} + \Delta t^2 a(x_i)/2 \quad (9)$$

$$v_{i+1} = v_{i+1/2} + \Delta t a(x_{i+1})/2 \quad (10)$$

さらにまた、速度を消去して x_{i-1}, x_i, x_{i+1} の関係式の形でかいてあることもあるかもしれない。この時は前回紹介した Stormer-Cowell 公式のもっとも簡単なものと一致する。なお、すべて違う名前がついていたりするが、結果は丸め誤差を別にすれば完全に同じである。時々、これらが違うものであるかのように書いてある教科書があるので注意すること。

この公式は局所誤差が $O(\Delta t^3)$、大域誤差が $O(\Delta t^2)$ である。

さて、局所誤差という観点からはこれは決して良い公式というわけではないが、現実にはこの公式は非常に広く使われている。

これは、別にもっとよい方法を知らないからとかではなく、実はこの方法がいくつかの意味で非常に良い方法であるからである。いくつかの意味とは、例えばエネルギーや角運動量のような保存量が非常によく保存するということである。これらの保存量については多くの場合に誤差がある程度以上増えない。

この、ある程度以上誤差が増えないというのは目覚しい性質である。通常の方法では、エネルギーの誤差は時間に比例して増えていく。従って、長時間計算をしようとすればそれだけ正確な計算をする必要がある。ところが、エネルギーの誤差は溜っていかないのならば、かならずしも精度を上げる必要はないとも考えられる。

もちろん、エネルギーが保存していればそれだけで計算が正しいということにはならない。が、理論的には、いくつかの重要な結果が得られている。まず、

1. leapfrog は symplectic method のもっとも簡単なものの一つである。
2. leapfrog は symmetric method のもっとも簡単なものの一つである。

Symplectic method については、以下のようなことが知られている

1. symplectic method は、すくなくともある種のハミルトニアンに対して使った場合に、それに近い別のハミルトン系に対する厳密解を与えることがある。
2. 周期解を持つハミルトン系に対して使った場合に、どんな量でも誤差が最悪で時間に比例してしか増えない。
3. 時間刻を変えると上のようなことは成り立たなくなる

これに対し、 symmetric method については以下のようなことが知られている

1. 周期解を持つ時間対称な系に対して使った場合に、どんな量でも誤差が最悪で時間に比例してしか増えない。

2. 時間刻を変えてもうまくいくようにすることも出来る。

以下、まず数値例でこれらの性質を確認し、それからなぜこのようなうまい性質を持つのかについて直観的な説明を与えよう (厳密な説明 / 証明には力学系の積分可能性に関するかなり深い知識が必要となる)。今週はシンプレクティック公式を扱う。

3 数値例

3.1 調和振動子

能書きを聞いていても良くわからないので、実例を見てみよう。まず、簡単な例として調和振動子

$$\frac{d^2x}{dt^2} = -x \tag{11}$$

を leap frog と 2 階のルンゲクッタで解いた例を示す。初期条件は $(x, v) = (1, 0)$ で、時間刻みは $1/4$ である。

軌道とエネルギーを図に示す。非常に特徴的なのは、 leap frog ではエネルギーが周期的にしか変化しないのに対し、ルンゲクッタでは単調に増えていることである。

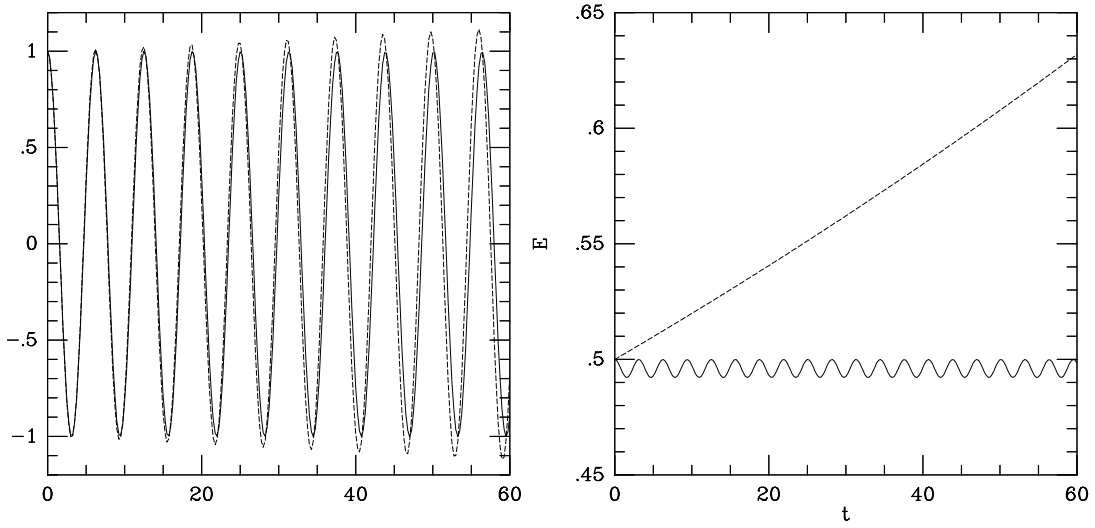

図 1: 調和振動子の数値積分。左 軌道。右 エネルギー。破線は 2 次のルンゲクッタ、実線は leapfrog の結果

ルンゲクッタでは単調に変化するというのは前に説明した通り (2 階のルンゲクッタでは虚軸を安定領域に含まないため) である。さて、これに対し、 leapfrog ではエネルギーが変化していないが、これはどういうことなのであろう ?

実は、この調和振動子の場合には、 leapfrog 公式は以下の量

$$H' = \frac{1}{2}(x^2 + v^2) - \frac{h^2}{4}x^2 \tag{12}$$

を保存するということを確かめることが出来る。つまり、 (x, v) で与えられる位相平面の上で考えると、 leapfrog 公式の解は上の式で与えられる楕円の上にのっているのである。このために、エネルギーの誤差がある値よりも大きくなり得ないことになる。

3.2 非線形振動

では、非線形振動ではどうだろう ?簡単な例として

$$\frac{d^2x}{dt^2} = -x^3 \tag{13}$$

を leap frog と 2 階のルンゲクッタで解いた例を示す。初期条件は $(x, v) = (1, 0)$ で、時間刻みは $1/8$ である。

軌道とエネルギーを図に示す。調和振動の場合と同様に、 leap frog ではエネルギーが周期的にしか変化しないのに対し、ルンゲクッタでは単調に増えている。

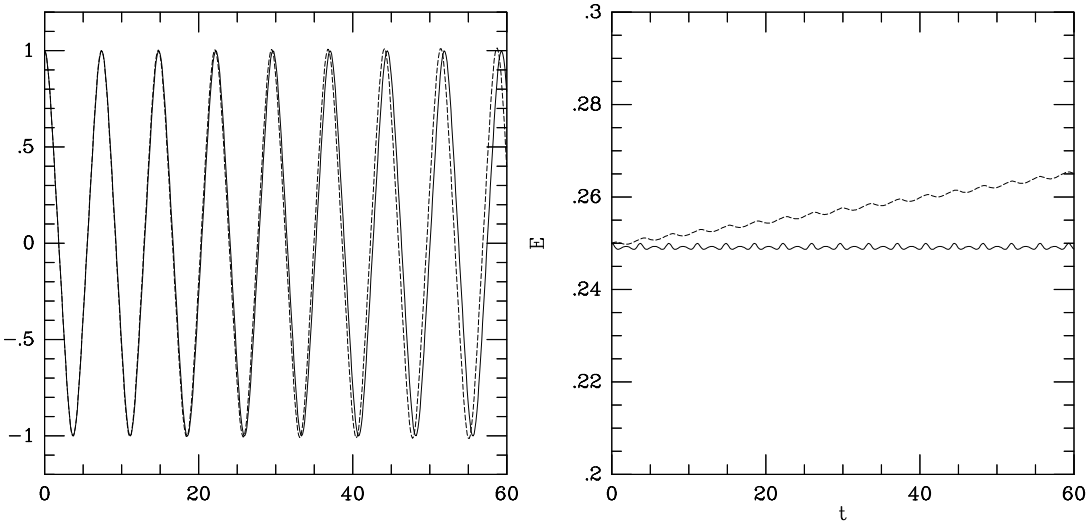

図 2: 非線形振動の数値積分。左 軌道。右 :エネルギー。破線は 2 次のルンゲクッタ、実線は leapfrog の結果

この場合も保存量があるので、頑張れば求まるかもしれない。

4 シンプレクティック公式

さて、 leapfrog 公式は、上で見たようにハミルトン系に対してエネルギー誤差が有界に留まるという大きな特長がある。が、 2 次精度でしかない。もっと高次の方法はないのだろうか、またあると

すればどういう原理で作れるのだろうか。

高次の方法を構成する一つのアプローチが、シンプレクティック公式といわれるものである。これはなにかというと、積分公式がシンプレクティック写像になるように作るということである。

と、これでは意味がわかりませんね。シンプレクティック写像とは、ようするに正準変換のことである。正準変換とはなにかというのは解析力学の入門書をみて欲しいが、直観的には、力学系を不変に保つ、つまり変換まえの座標系で求めた軌道を変換したものと、変換後の座標系での力学系の軌道が厳密に同じになるようなものである。

ハミルトン力学系の解そのもの (ある時刻 t での座標から、 $t+h$ での座標に移す変換) もシンプレクティックである。まあ、だから、シンプレクティックになっているような積分公式は、そうでないものに比べてなんとなく力学系の性質にあっているような気はする。

で、いいたかったことは何かっていうと、上の leapfrog 公式はこのシンプレクティック性を満たしているということだった。詳しくは、 数理科学」1995 年 6 月号にのった吉田による解説記事でもみてもらうことにして、ここでは高次の公式にはどんなものがあるかという話をしておく。

4.1 陽解法

陽解法の組み立て方はいろいろある。一つは、 RKN 系の公式で、係数をシンプレクティック性を満たすように決めるということである。これはここ 10 年で無数に論文がでた。4 次、あるいは 6 次の公式としては、吉田や鈴木による作用素分解に基づく公式が良く知られている。

これらの方法の原理は、要するに上の leap frog をタイムステップを変えていくつか組合わせるというものである。うまくタイムステップを組み合わせると誤差の高次の項を消すことができるわけである。3 段 4 次の公式、7 段 6 次の公式等が吉田によって導かれている。

なお、実は陽解法はハミルトニアンが $T(p)+V(q)$ の形の場合にしか使えないが、大抵の問題はこう書けることはいうまでもないであろう。

また、 RKN 系の公式を力任せに構成する試みもあり、4 次から 8 次までの公式が作られている。計算精度という観点からはこちらのほうが leapfrog を組合わせるものよりも圧倒的にいいということがわかっている。

4.2 陰解法

陰的ルンゲクッタについては、係数がある特別な条件を満たせばシンプレクティックになるということがわかっている。いろいろな公式が知られているが、特に今まで何度もでてきた陰的ガウス法が次数に無関係にシンプレクティックであるということがわかっている。これは他の観点からも 最良」な公式であるので、それ以外の方法を使う必要はそれほどないであろう。なお、ハミルトン系は普通 non-stiff なので、逐次代入法で収束させることができ、収束も速い。

4.3 シンプレクティック公式の意味

さて、シンプレクティックであるということと、「良い」ということの間にはちゃんとした理論的な関係があるのであろうか ?一応あるということになっている。つまり、あるハミルトニアン H で表される系をシンプレクティックな p 次の公式を使って積分した解は、別のハミルトニアン H'で与えられるシステムの厳密解になっていて、H と H' の間に

$$H = H' + h^{p+1}H_p + O(h^{p+2}) \tag{14}$$

という関係がある (H'を求める数列が収束すれば) ということがわかっている。

なお、例えば上の調和振動子の場合には実際に数列が収束し、H' が求まっている。が、これは極めて例外的な場合で、一般の場合には収束するかどうかも明らかではないようである。

収束するかどうか明らかではないのでは、使っていいことがあるという保証はないではないかと思うかもしれない。理論的にはその通りなのであるが、実際にはいろいろな問題に適用されて、従来の方法よりも高い精度が得られるということが確認されている。

5 シンプレクティック公式の問題点と対応

さて、式 (14) をみるとわかるように、シンプレクティック公式に付随するハミルトニアン H' には時間刻み h が入っている。従って、h をふらふら変えると H' も変わって、結果的に求まった数値解は一つの力学系の軌道ではないなんか変なものになってしまう。ということは、可変時間刻みにするとシンプレクティック公式はうまく働かないのではないかということが想像される。

じつはその通りで、例えばシンプレクティックで埋め込み型のルンゲクッタというものを作って、実際に時間刻みを変えてみた人がいる。その結果、普通のルンゲクッタよりも良くならないということが発見された $(1992$ 年頃$)$。問題によってはこれは致命的な欠陥となるので、さまざまな対応法が精力的に研究されているのが現状である。が、あまり一般的にうまくいく方法というのは見つかっていないようである。つまり、 stiff な問題の場合にあったような、万能な公式というのはシンプレクティック公式に関する限り知られていない。

なお、シンプレクティック公式において普通に時間刻みを変えると、それはシンプレクティックではなくなるということが Gear と Skeel により一般に証明されている。彼らの結果は、時間刻みも含めて考えると、写像が時間方向に歪んだもの (もとの位置によって時間刻みが変わるため) になり、そのために元の公式がシンプレクティックであれば時間刻みを変えると必ずシンプレクティックでなくなるというものである。

それでは、時間刻みを変えるのは絶対に不可能かというと、以下のような考えかたでの研究が進められている。ハミルトニアン H を

$$H = H_1 + H_2 + \cdots \tag{15}$$

と複数の項の和にわけ、それぞれについて違う時間刻みを与えることで実効的に時間刻みを変えるというものである。これについては来週か再来週にもう少し詳しく触れることにしたい。

もう一つのシンプレクティック公式の問題点は、「写像」であるということから一段法、具体的には

ルンゲクッタ型の公式であるので、局所誤差に対する計算量という観点からは線形多段階法に比べて必ず悪いということである。

一般に多段階法についてシンプレクティック性のようなものがありえるかどうかというのは、現在研究が進みつつあるが良くわかっていない。

6 問題

1. 上に紹介した吉田による解説記事を参考に、 4 次および 6 次のシンプレクティックな RK 法をプログラムしてみよ。また、書いたプログラムを使って
   - 一次元調和振動子
   - ケプラー問題

   など、厳密解のわかっているハミルトン系の数値解を求め、特に長時間積分の時の誤差をシンプレクティックでない公式での解と比較せよ。また、ステップサイズと積分時間への誤差の依存性を実験的に求め、理論的に予測される結果とあうかどうか調べよ。
2. 2 次および 4 次の陰的ガウス法について同様なことを試みよ。
3. 以下のポテンシャルの下での一次元振動について

$$V(r) = -1/\sqrt{r^2+\epsilon^2} \tag{16}$$

   (a) 等時間刻みの 4 次シンプレクティック法 (例えば吉田の方法) を使って時間積分することを試みよ。安定な解を得るためにはステップサイズがどの程度である必要があるか ?なお、計算例としては例えば $\epsilon = 0.01, r(0) = 1, dr/dt|_{t=0} = 0$ としてみよ。

   (b) 適当な方法で可変時間刻みにして、精度と計算量 (ステップ数) の関係を等時間刻みの場合と比較せよ。
4. 重力多体問題

$$\frac{d^2x_i}{dt^2} = \sum_{j\neq i} -\frac{m_j r_{ij}}{r_{ij}^3} \tag{17}$$

   は特別な初期条件を除いては安定な軌道を持たない。数個の粒子の場合について適当な初期条件からいろいろな方法で数値積分し、しばらく計算した後での答を比較してみよ。さらに、結果が 「正しい」ということができるのはどういう場合かを考察せよ。

7 来週の予定

あと一回できるけど、一応この講義は今回 (予定では 7/12) でおしまい。レポートの〆切、提出場所は掲示を出してもらいます。