システム数理IV 第11回

牧野淳一郎

1998 年 6 月 28 日

1 ハミルトン系とそのための解法 :つづきのつづき

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。

前回は、リープフロッグ公式の高次への一般化としてシンプレクティック公式、すなわち、積分公式自体が正準変換になっているようなものを考えた。今回は、別のアプローチである対称型公式というものを考える。

1.1 対称型公式とは

さて、まず対称型公式とはなにかということだが、まず時間反転に対する対称性というものを定義しておこう。時間反転に対する対称性とは、常微分方程式

$$\frac{dy}{dx} = f(x,y) \tag{1}$$

に対する一段法

$$y_{i+1} = F(x_i, y_i, f, \Delta x) \tag{2}$$

が、

$$y_i = F(x_{i+1}, y_{i+1}, -f, \Delta x) \tag{3}$$

を満たすこと、つまり、直観的には、ある微分方程式系があって、それを1ステップ分数値解を求めたとする。で、そこから逆に戻ると厳密に元の値に戻るということである。 (ここでは丸め誤差はないものとする)

で、一段法の場合には、この意味で対称なものを対称型公式ということにする。

具体例で考えてみよう。例えば前進オイラー法は対称型ではない。これは、いった先で導関数を計算すれば、一般にもとのところでの導関数とは違うから当然であろう。前進オイラー法が対称ではないのだから、その逆写像である後退オイラー法も対称型ではないことになる。

では、対称型にはどういうものがあるかということだが、明らかに対称型であるものとしては、台形公式

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2}(f_i + f_{i+1}) \tag{4}$$

がある。これが上の対称性を満たしていることはいうまでもない。

さて、なぜこの型の公式を考えるかということであるが、これは実はそれほど簡単な話ではない。実験的には以下のようなことが知られている。

- ハミルトン系に対して対称型公式を使った場合、エネルギーや角運動量などの保存量の誤差がある範囲内にとどまる
- 時間刻みを変えても上の性質を保つことが出来る

前のほうの性質はシンプレクティック公式と同じであるが、後の方の性質はシンプレクティック公式よりもある意味でよいものである。

理論的な話は来週に回して、今日はとりあえず対称型公式にはどんなものがあるかという話をしておこう。

さて、一階の方程式に対する一段法という制限をつけた場合、つまり、ルンゲクッタ法の場合、対称な公式はかならず陰的公式になる。逆に、陰的公式であれば対称型のものを作るのは容易である。つまり、ルンゲクッタ法を与える行列 A とかベクトル b, c が対称になっていればいい。

何度もでてきたので予想されるかもしれないが、陰的ガウス法は対称型公式でもある。

一階の系に対する一段法では、そういうわけですでに紹介してきた陰的 RK のほかにうまい方法があるわけではない。それでは、

- ハミルトン系専用の解法ではどうだろうか
- 多段法ではどうなっているのだろう
- それ以外の方法はないのだろうか

以下、順番に考えていくことにする。

1.2 ハミルトン系用の陽的対称型 RK 公式

実は、前回にすでに述べたように、 leapfrog 公式は対称型でありしかも陽公式である。で、前回紹介した leapfrog の組合わせで作られる公式も、実はすべて対称型になっている。

1.3 対称型線形多段法

さて、一段法という枠を外してみよう。2 階の方程式用の線形多段階法としては、すでに Stormer-Cowell 法について述べた。が、これは対称型ではない。

というようなことをいう前に、線形多段階法に対する対称性の定義を与える必要がある。ここでは、以下のように定義しておこう。2 階の方程式用の線形多段階法は、一般に

$$\alpha_0 x_{i+p} + \cdots \alpha_p x_i = h^2(\beta_0 f_{i+p} + \cdots \beta_p f_i) \tag{5}$$

という形に書くことができる。 $\beta_0 = 0$ なら陽的であるし、そうでなければ陰的公式である。ここ

表 1: Quinlan & Tremaine 1990 による対称型公式の係数

TABLE II. Symmetric multistep methods.

	8th-order		10th-order		12th-order		14th-order	
	$H_0^2 = 0.52$ $C_{10} = 0.0630$		$H_0^2 = 0.17$ $C_{12} = 0.0576$		$H_0^2 = 0.046$ $C_{14} = 0.0561$		$H_0^2 = 0.012$ $C_{16} = 0.0535$	
i	α_i	$12\,096\beta_i$	α_i	$241\,920\beta_i$	α_i	$53\,222\,400\beta_i$	α_i	$237\,758\,976\,000\beta_i$
0	1	0	1	0	1	0	1	0
1	−2	17 671	−1	399 187	−2	90 987 349	−2	433 489 274 083
2	2	−23 622	1	−485 156	2	−229 596 838	2	−1 364 031 998 256
3	−1	61 449	−1	2 391 436	−1	812 627 169	−1	5 583 113 380 398
4	0	−50 516	1	−2 816 732	0	−1 628 539 944	0	−14 154 444 148 720
5			−2	4 651 330	0	2 714 971 338	0	28 630 585 332 045
6					0	−3 041 896 548	0	−42 056 933 842 656
7							0	48 471 792 742 212

Note to TABLE II

We list only half the coefficients; the others are given by $\alpha_i = \alpha_{k-i}, \beta_i = \beta_{k-i}$, with k equal to the order of the method.

で、対称型であるとは、係数が

$$\alpha_i = \alpha_{p-i}, \quad \beta_i = \beta_{p-i} \tag{6}$$

を満たすということである。 leap frog をこの形にしたものは、 前に出てきた通り

$$x_{i+1} - 2x_i + x_{i-1} = h^2 f_i \tag{7}$$

というものであり、これが上の対称性の定義を満たしていることはいうまでもないであろう。

上の意味で対称な公式は、実際に時間反転に対して対称であるということに注意しておこう。つまり、$(x_i, ...x_{i+p-1})$ から上の式で x_{i+p} を求めたとする。時間を逆転させた解を考えて、$(x_{i+p}, ...x_{i+1})$ から x_i を求めるということを考えても、使う式が時間が逆転していないものと同じになっているのである。

Stormer-Cowell が対称ではないというのはこの意味、つまり、$(x_i, ...x_{i+p-1})$ から x_{i+p} を求める式と $(x_{i+p}, ...x_{i+1})$ から x_i を求める式が同じものではないということである。

このような公式は、 1970 年代から知られていたが、注目されるようになったのは 1990 年代に入ってからである。特にトロント大の Quinlan, Tremaine らが 14 次までの対称型公式を導いた。表 1 にその値を示しておく。

なお、非常に最近 (今年) になって、国立天文台の福島によって、Quinlan & Tremaine によるものよりもはるかに良い性質を持つものが導かれている。これについては原理も合わせて後で触れる。

1.4 エルミート型公式

一般に対称型というわけではないが、4 次の対称型公式を導く特別な方法としてエルミート型 (あるいはエルミート ・オブレヒホフ型) と呼ばれる公式のクラスについてここで触れておこう。

エルミート型公式は、線形多段階法のアダムス型公式の一つの一般化である。どのような意味において一般化であるかというと、アダムス型と同じように補間多項式を積分することで新しい時刻で

の値を求めるところは同じである。違うところは、アダムス型公式では補間多項式を作るのに関数の値を使う (ラグランジュ・ニュートン補間) が、エルミート型公式では、関数の導関数の値も使うのである (エルミート補間)。

もっとも単純な発想としては、テイラー法というものがある。つまり、微分方程式

$$\frac{dy}{dx} = f(x, y) \tag{8}$$

というものがあったとしたら、

$$\frac{df}{dx} = \frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial y}\frac{dy}{dx} \tag{9}$$

という関係式を使って f の全微分を求めることが出来、同様に高次の導関数もどんどん計算していくことが出来る (微分が式で書ければ)。これらを使って直接テイラー級数を評価して近似解を求めるのである。

高次の導関数が簡単に求められる場合 (例えば線形な系とか) には、この方法はかなり強力である。線形多段階法やルンゲクッタに比べて誤差項の係数がずっと小さく、タイムステップが大きくとれるからである。

が、多くの問題において、高階導関数の直接計算は現実的ではない。これは、計算量が指数関数的に爆発するのが普通だからである。とはいえ、f の一階導関数や二階導関数くらいならば指数関数的といってもたかがしれている。しかしながら、これではテイラー法では 2 次や 3 次の公式しか作れない。実用的な公式としては、(leap frog のような特別に良い性質をもっているとかいうのでなければ) もうちょっと高次のものが必要である。

そこで考えられるのが、高階導関数を使ってさらにルンゲ・クッタ型とか線形多段階法のような公式を作ることである。例によってもっとも簡単な場合というのを考えると、それは y_i と y_{i+1} のところで f の一階導関数の値を使うもの (高次導関数を使わないものであれば台形公式に相当) の一般化ということになろう。

台形公式は、2 次の陰的アダムス型公式と考えることができる。つまり、f を線形補間してそれを積分しているわけである。これに対し、f と $f' = df/dx$ を使う補間というのはどういうものかということを考えてみると、これは 3 次多項式を構成できることがわかる。具体的には、導関数の近似多項式を

$$f(x_0 + h) = f_0 + ah + \frac{b}{2}h^2 + \frac{c}{3!}h^3 \tag{10}$$

としたとき、

$$\begin{aligned} a &= f'_0 \\ b &= \frac{-6(f_0 - f_1) - 2\Delta x(2f'_0 + f'_1)}{\Delta x^2} \\ c &= \frac{12(f_0 - f_1) + 6\Delta x(f'_0 + f'_1)}{\Delta x^3} \end{aligned} \tag{11}$$

という形で係数を求めることが出来る。さらに、上の近似多項式を積分してやれば、結局

$$x_1 = x_0 + \frac{h}{2}(f_0 + f_1) + \frac{h^2}{12}(f'_0 - f'_1) \tag{12}$$

という形の公式が得られる。これは台形公式と同じく陰的公式である。対称型であることは明らかであろう。

この公式は実装が簡単であるわりには精度が高く、また対称型であるというよい性質をもつこともあり、良く使われるようになりつつあるようである。収束させるための反復には普通の逐次代入が使える。

2　対称型一段公式における時間刻みの変更

対称型一段公式には、対称性を保ったままで時間刻みを変更できるというシンプレクティック公式では (普通の意味では) なかった良い性質がある。以下では、どのようにしてそれが可能であるかを簡単に述べておく。

今、任意の対称型一段法があって、その時間刻みを与える関数として $h(x,y)$ が与えられているとする。ここで $h(x,y)$ はなんでもいいが、これも一段法である、つまり前のステップの値とかを必要としないものであるとする。

一般に、 $h(x,y)$ によって刻み幅を決めて求めていった数値解は、時間反転に対する対称性を満たしていない。つまり、1 ステップ積分してから、逆に戻すと、タイムステップが変わってしまうためにもとのところに戻らない。このことのために、例えば周期軌道の場合に誤差が周期的にならないということが起こるわけである。

刻み幅を変えつつ時間反転に対する対称性を保つ一つの方法は (これ以外の方法もあるかもしれないが、今のところ知られていない)、 $h(x,y)$ 自体に対称性を持たせることである。つまり、一段法を

$$y_1 = y_0 + h(x_0,y_0)F(x_0,y_0) \tag{13}$$

という形に書いた時、

$$h(x_0,y_0) = h(x_1,y_1) \tag{14}$$

がなりたつことを保証するように h を決めるのである。具体的には、上の対称性が成り立っていないような時間刻みの式 h があった時に、

$$h_s = \frac{h(x_0,y_0)+h(x_1,y_1)}{2} \tag{15}$$

によって対称化した時間刻みを作ればいいことになる。この場合時間刻み自体が陰的に決まることになるが、とにかく対称性という要求は満たされるのである。

3　対称型一段公式における時間刻みの変更:別のアプローチ

さて、時間刻みの変更にはもう一つ全く違ったアプローチがある。 $h(x,y)$ が時間刻みを与える関数であるとすると、新しい独立変数 s を

$$ds = h(x,y)dx \tag{16}$$

によって導入し、元の微分方程式

$$\frac{dy}{dx} = f(x, y) \tag{17}$$

を s を独立変数として書き直す。 x はいまや従属変数なので、方程式

$$\frac{dx}{ds} = \frac{1}{h(x, y)} \tag{18}$$

を積分して求める必要があるが、この変換された方程式は s の刻み幅一定で解けることになる。この場合には時間刻みを陰的に決める必要はない。

が、この方法を使った場合、リープフロッグのような陽的方法は多くの場合に使えない。これは、変換したあとの系はハミルトン系であったとしてもハミルトニアンがリープフロッグが使える特別な形 （p と q が分離しているもの）になっていないからである。

さらに、元の方程式を書き直す必要があるので、プログラムを書くのは結構大変な作業になることが多いということも、この方法の問題点ではある。

4 来週の予定

次回は、このような古典力学系の場合について 「計算結果が正しい」というのはどういう意味かということを振り返ってみる。