システム数理IV 第12回

牧野淳一郎

1998 年 7 月 7 日

1 ハミルトン系に対する安定性と 「振動的に硬い」系

この講義は今日でおしまい。来週以降の休講掲示とかは (多分) 出さないので、講義がなくても驚かないように。

というわけで、今日はハミルトン系に対して数値解が安定であるとはどういうことかということを考えることにする。

2 線形安定性と P-安定

ハミルトン系の安定性とかいっても、一般的な議論がそんなにできるわけではなくて、多様な数値積分法に対する安定性のちゃんとした解析が出来ているのは結局線形の問題 (調和振動) の場合ということになる。というわけで、まず、調和振動の場合の理論の枠組について説明しておこう。

2.1 多段階法に対する周期性区間

まず、先週紹介した対称型多段階法について、線形安定性の意味をあきらかにしておこう。一階の方程式の場合には、線形安定性とは線形方程式の解がいつかは原点に向かうこと、つまり、線形の方程式に対応する差分方程式の解の実部が負であるということであった。

しかし、ハミルトン系の場合にはこれが数値解がもとの解を表現しているということの適切な条件とはいい難いというのはすでに述べた通りである。というのは、調和振動の場合では明らかなように、真の解というのは無限に振動が続くのに対し、線形安定性の意味で安定な数値解は原点にむかって落ちていくことになるからである。このため、例えばエネルギーは保存し得ない。

というわけで、調和振動の方程式

$$\frac{d^2x}{dt^2} = -\omega_0^2 x \tag{1}$$

に、 ℓ 階の方程式用の) 多段階法

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

を適用した場合の解について考えてみる。今、

$$H = h\omega_0 \tag{3}$$

とおけば、数値解法から得られる差分方程式は

$$\sum_{i=0}^{p}(\alpha_i + H^2\beta_i)x_{n-i} = 0 \tag{4}$$

と書くことができる。この差分方程式の一般解は、

$$x_n = \sum_{s=1}^{p} A_s r_s^n \tag{5}$$

ここで、 r_s は代数方程式

$$\Omega(r, H^2) = \rho(r) + H^2\sigma(r) = 0 \tag{6}$$

の解であり、 ρ と σ はそれぞれ第一特性多項式、第二特性多項式とよばれるものであり、定義は

$$\begin{aligned} \rho(r) &= \sum_{i=0}^{p} \alpha_i r^{p-i} \\ \sigma(r) &= \sum_{i=0}^{p} \beta_i r^{p-i} \end{aligned}$$

である。なお、面倒なので方程式 (6) は重根を持たないということにしておく。

さて、一般解が (5) の形で与えられるということは、つまり、数値解が一定の振幅で振動を続けるための条件は、方程式 (6) のすべての解の絶対値が 1 に等しい、つまり

$$|r_s| = 1 \tag{7}$$

ということである。そんな都合のいいことが本当にあるのだろうか ？

2.2 例 ：leapfrog 公式

というわけで、例によって leap frog 公式

$$x_{i+2} - 2x_{i+1} + x_i = h^2 f_i \tag{8}$$

に適用してみることにする。

$$\begin{aligned} \rho(r) &= r^2 - 2r + 1 \\ \sigma(r) &= r \end{aligned} \tag{9}$$

となるので、 $2\eta = 2 - H^2$ とおけば、方程式 (6) は

$$r^2 - 2\eta r + 1 = 0 \tag{10}$$

となる。これについては、すぐにわかるように複素数解の絶対値はかならず 1 なので、解の絶対値が 1 である条件というのは単に複素数解をもつ条件ということになり、少し計算すれば

$$0 \geq H^2 \geq 4 \tag{11}$$

であればよいということがわかる。つまり、 $h\omega_0 \leq 2$ ということである。従って、周期の $1/3$ より少し小さいくらいの刻み幅をとっておけば、解が振動的であるという性質が保存されているということがわかる。

なお、上の、解の絶対値が 1 であるような H の領域を、周期性区間 interval of periodicity という。

2.3 P-安定性

さて、線形安定性の時に A-安定性という概念を導入したように、周期性についても同様なことが考えられよう。つまり、周期性区間が非負の実数軸全体を含むということを特に P-安定であるという。P-安定についても、A-安定と同様なダールキストによる以下の結果が知られている ：

- P-安定な線形多段階法の次数は 2 を越えることが出来ない。

なお、 P-安定な公式は以下の形になる ：

$$x_{i+2} - 2x_{i+1} + x_i = \frac{h^2}{4}(f_{i+2} + 2f_{i+1} + f_i) \tag{12}$$

これは実は台形公式である。

2.4 有限の周期性区間を持つ多段階法

さて、P-安定な公式というのは台形公式だけなわけだが、実用上は P-安定でなくても、周期性区間が極端に小さくなければ使えるであろう。つまり、 H の最大値が解の周期に対して周期性をたもつ最大のステップの大きさを与えるので、まあ、それが存在して極端に小さくなければいいではないかということになる。そのような、有限の周期性区間をもつ線形多段階法をつくる方法として現在のところ唯一しられているのが、前回出てきた対称型公式である。Quinlan & Tremaine に従って概要を説明すると、 数値解が $x_n = e^{inh\omega}$ の形をしているとして、 これが従う方程式はもちろん

$$h^2\omega_0^2 = \frac{\alpha_0 e^{ip\omega h} + \cdots \alpha_p}{\beta_0 e^{ip\omega h} + \cdots \beta_p} \tag{13}$$

となるが、右辺の分母分子に $e^{-ip\omega h/e}$ を掛けてみると、対称型公式で $\alpha_{p-i} = \alpha_i$ とかの性質があると、ちょうどそれらの項の虚部が打ち消し合うので、結局任意の ω について右辺が実数ということになる。

あとは、実際に値が正であれば、周期性区間に入っているということになる。

周期性区間がどこまでであるかというのは、公式を決めて数値計算してみないとよくわからない。これについてはまだそんなに研究されていなくて、最近福島によって系統的な研究がでたばかりである。

福島の結果では、陽公式の場合には周期性区間を大きくすると誤差定数が大きくなってしまう。が、陰公式ではそのような問題はなく、次数に無関係に周期性区間が 1 程度あるものが見つかっている。

2.5 ルンゲクッタの場合

さて、ルンゲクッタの場合にも、上と全く同様に周期性区間とか P-安定性とかを考えることができる。もうそれほど驚くべきことではないと思うが、例によって以下のようなことがわかっている

- 対称型ルンゲクッタは有限の周期性区間を持つ。
- 陰的ガウス法は P-安定である。

なお、陰的ガウス法以外にも P-安定な公式は知られているが、ここでは紹介しない。

3 線形問題の場合の数値解と真の解の関係

というわけで、線形のハミルトニアンをもつ場合、つまりは調和振動の場合には、周期性区間とか P-安定とかいった概念が定義できる。この時、真の解と数値解の関係はどうなっているかということを考えてみる。

どちらも調和振動になっているわけなので、厳密解と数値解で違うのは周期だけである。詳しい説明は省くが、厳密解と数値解の角振動数に対して、

$$\omega = \omega_0 + O(h^p) \tag{14}$$

という関係があることが証明されている。つまり、周期性区間に入っている場合、周期自体の誤差が押えられているのである。

この場合、例えば位置や速度の大域誤差というものを考えた時、ずっと前にやったような時刻の指数関数的に増える誤差評価ではなく、時間の 1 次式でしか増えない精密な誤差評価が可能になる。つまり、大域誤差の意味で求まった解がどの程度正しいかということが (丸めを別にすれば) 厳密に議論できることになる。

4 非線形問題の場合

4.1 周期解の場合

非線形問題の場合の数値解の振舞いの解析は、線形問題の場合に比べてはるかに困難になる。この根本的な理由は、前にやった安定性の場合と同様、数値解が真の解に近いかどうかということが、真の解が「可積分」でないとうまく定義できないからである。

ここで、可積分というのは、もとのハミルトン力学系の性質として解析的な解を持つということである。これがじゃあいったいどういうことかというのは、やりはじめるとそれだけで 1 学期かかるので、興味がある人は「力学」(大貫良夫、吉田春夫、岩波書店) でも見てもらうことにする。

とはいえ、定義を与えないと話が進まない。ある力学系が可積分であるというのは自由度の数と等しい数の保存量を持つことである。この時は、位相空間内での軌道が (多重) 周期軌道になる。いいかえれば、カオス的にはならない。逆に、可積分でないということとカオス的であるということはほぼ対応する。 (もちろん微妙な場合というのがあるが)

さて、非線形の場合でも、厳密解が周期解ならばシンプレクティック公式や対称型公式で求めた数値解も周期解になるということが非常に最近になって証明された。ここではこの証明がどういうものかは触れないが、この場合には厳密解と数値解の間の差が線形の場合とおなじように $O(h^p)$ で押えられるということになる。従って、数値解がどの程度正しいかということに関しては非常に正確に押えられる。

4.2 非周期解の場合

さて、なぜわざわざ数値計算をするかということを考えてみると、多くの場合には可積分ではないから数値計算するのである。可積分ならば数値計算しなくても解が求まるはずだからである。

しかし、この場合には、数値解の正しさというものの意味はあまり自明ではなくなる。というのは、もともとの厳密解の場合にも 「正しい解」というものの意味が明確ではなくなるからである。

可積分でないということとカオス的ということはほぼ対応すると考えて良いので、以下カオス的である場合について考える。カオス的であるための必要条件は、リヤプノフ指数が正であることであった。

リヤプノフ指数が正であるというのはどういうことかというと、非常に近い初期条件から出発した厳密解の間の距離が、指数関数的に広がるということである。従って、仮に数値解が本当に厳密解通りのものを求めていたとしても、初期条件に誤差があればそれが指数関数的に拡大し、しばらくすれば真の解から大きくずれてしまうといったことが起きる。

この場合、数値計算をする目的により、どのような解に意味があるか、また、どのような計算が可能かということが違ってくる。

まず、何が不可能かということを明確にしておこう。初期条件が有限の精度でしか知られていなければ、その誤差が指数関数的に増大するため、仮に無限に高い精度で数値計算したとしても、ある時刻での解の精度には限度があり、その限度が時間の指数関数で悪くなっていく。従って、誤差の指数関数的な成長のタイムスケールの例えば 10 倍とか 30 倍を越えて正確な軌道を求めるということは原理的に不可能である。

従って、可能なことは以下の 2 つということになる。

- 指数関数のタイムスケールよりも短い範囲で正確な軌道を求める。
- 指数関数のタイムスケールよりずっと長いところで、なんだかよくわからないけど数値解を求める。

第一の場合にはなにを計算しているかは明確であり、誤差も精密に評価出来る。つまり、リヤプノフ指数が前にやったリプシッツ連続の条件の値そのものなので、誤差の上界が大域誤差の式でほぼ正確に押えられるのである。この場合にはそれほど議論するべきことはない。

それでは、第二の場合についてはどうであろうか ？

こちらは、実は理論的にも実験的にもまだ良くわかっていないのが現状である。シンプレクティック法の場合には、それで求まった解が元のハミルトニアン H に近い H' で表される系の厳密解になっていることがあるという話をしたが、そのようなものが具体的に求まっているのは実は可積分な系に限られていて、非可積分なハミルトン力学系に対してシンプレクティック法を使った時に良いことがある、つまり H' が存在するかどうかはわかっていない。つまり、形式的に級数で書けるものの、それが収束するかどうかは知られていない。

しかし、それにも関わらず、実験的には多くの場合に良い結果が得られている。では、ここで、良いというのはどういう意味かというと、単に保存量であるとわかっているもの、例えばエネルギーや、系によっては角運動量といったものの誤差が成長していかない、つまり有界に留まるということである。

このことがもっとも良く知られているのは分子動力学計算である。分子動力学計算というのは、例えば水とかタンパク質とかいったマクロな物質の物性や非平衡な変化を、ミクロな分子一つ一つの軌道を時間積分して計算することで調べようというものである。もちろん、実際の水を構成している分子の数はあまりの多いので、そのまま計算することはできず、せいぜい 1000 個とか $10{,}000$ 個程度の分子から出来た系について計算していろいろ調べるということになる。

この時、分子一つの軌道については、それが隣の分子までのの距離を動くくらいの時間が上のリヤプノフ指数に入ってくることがわかっている。これは具体的には 10^{-14}秒程度である。これに対して、数値計算で熱平衡状態の分布関数を求めるといった場合には 10^{-10} 乗程度、非平衡の変化の場合も同程度の計算が必要になる。

従って、計算は指数関数のタイムスケールの 1 万倍程度することになり、誤差は 「分子がどこにあるかは全くわからない」という程度には大きい。つまり、例えばある分子の位置を初期条件で最後の 1 ビットだけ変えただけで、計算が終った時のその粒子の位置は全く変わってしまう。

この場合に計算結果に意味があるといえるかどうかは実はまだ理論的にははっきりしていない。分子動力学計算の一つの目的は、熱平衡状態での系の性質 (温度と圧力の関係とか、拡散係数など) を決めることであり、この場合には数値解が厳密解である必要はなく、それがエルゴード性を満たしていればいい。ところが、このエルゴード性というのが、そもそも元のハミルトン系が満たしているかどうかがまだ一般にはわかっていないという代物である。数値解が同なっているかなんてことは従っていっそうわからないのである。

そういう意味では、分子動力学計算に代表されるような、系の統計力学的な性質を直接シミュレーションによって調べるという方法の理論的な正当性は明らかではない。この根本的原因は、しかし、統計力学自体の理論的な正当性が明らかではないところにある。

つまり、カオスになっているような系の長時間計算では、理論的には意味がある答が出ているという保証はない。実験的にはうまくいく、つまり統計的な性質が理論的に予測できるものについては良く一致するということがわかっていて、広く使われているのであるが。

5 振動的に硬い方程式系

さて、最後に、振動的に硬い方程式系というものに対して簡単に触れておこう。これは、要するに、実数で高い振動数を持つような自由度がある系である。具体的な例では、例えば分子動力学計算の場合、分子内部での振動、変形は、分子全体が回転したり重心が動いたりするのに比べ何桁も速い。

前にやった硬い方程式用の解法はこの場合には使えない。というのは、これでは数値解では振動が減衰してしまうからである。

この場合には、普通の硬い方程式のような汎用でうまい方法があるわけではない。最近研究が進みつつあるのは、ハミルトニアンを自由度毎に分けて、それぞれ別の時間刻みを使う方法である。振動数の大きな自由度の数が少なければ、これで劇的に計算量を減らすことができる。

6 レポート問題追加

1. 以下の自由パラメータを持つ対称型線形多段階法

$$y_{k+2} - 2y_{k+1} + y_k = h^2[(1-\alpha)(f_{k+2} + f_k)/2 + \alpha f_{k+1}] \tag{15}$$

   に対して、
   (a) Interval of Periodicity を求めよ
   (b) 次数を求めよ。 2 より高くなることはあるか ？
2. 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。
3. 重力多体問題

$$\frac{d^2\boldsymbol{x}_i}{dt^2} = \sum_{j \neq i} -\frac{m_j \boldsymbol{r}_{ij}}{r_{ij}^3} \tag{17}$$

   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。

締め切りは 9 月 11 日、提出先は牧野の研究室 (15-704B) の前においたポストか、または電子メイルで makino@grape.c.u-tokyo.ac.jp あてに。