システム数理IV 第11回

牧野淳一郎

1999 年 6 月 28 日

1 ハミルトン系とそのための解法

前回は硬い方程式というものを扱った。これは、わりといろんなところに出てくるので、とりあえずそういうものがあるということは憶えておくといいことがあるかもしれない。

今日もそういう類の話である。今日の相手は「ハミルトン系」、要するに古典力学系である。が、ハミルトン力学ということで話を始めると、解析力学がどうで正準変換がこうだからとかいう難しい話にたちどころになってしまう。このへんは僕もよく知らないし、それだけで一学期分の講義になるくらいのものなので、ちょっと違う方向からいってみよう。

2 簡単な例題

古典力学系のもっとも簡単な例といえば、一次元調和振動子、つまり、運動方程式では

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

である。これの解はもちろん単振動するものであり、それは固有値が純虚数であるからである。

さて、前にも少し述べたように、このような、固有値が純虚数である、いいかえれば中立安定な場合、安定性解析はちょっと厄介になる。というのは、通常の意味で安定というのは、数値解がいつかは原点にいってしまうということ、いいかえればエネルギーが保存しないということを意味するからである。

つまり、例えば前回でてきた安定領域のある公式では、ほとんどのもので虚軸上の一定範囲では数値解が「安定」になってしまう。つまり、本当の解はいつまでも振動を続けるのに、数値解は減衰してしまうのである。もちろん、タイムステップを大きくとれば、絶対安定でない限り安定領域から外れるのが普通 (BDF のようにそうでないものもあるが) であり、振動しながら広がっていくような解になる。安定領域に虚軸を含まないような公式 (例えば前進オイラー公式) の場合では、かならず軌道が広がっていくことになる。つまり、虚数軸が安定性限界になっていない限り、必ず軌道から一方的に外れていってしまうのである。

つまるところ、線形系では安定性限界が虚数軸である (数値解に純虚数の固有値がある) というのが、数値解が厳密に振動的であるための必要十分条件ということになる。この時、数値解はもとの系の性質をある意味で良く表しているといえるであろう。

実は多変数の場合や非線形の場合でも本質的な事情は変わらない。ただし、こちらはまだいろいろ理論的にはっきりわかっていないことがある。が、大雑把にいうと同じような事情が成り立っている。つまり、もとが周期解であるときに、大抵の積分法では周期解から一方的にずれていく、つまり、保存量であるはずのエネルギー等が保存しなくなる。

もちろん、エネルギーが厳密には保存しないということが問題であるかどうかというのも実は難しい問題である。というのは、保存しないといってももちろん数値解の精度では保存しているわけだから、それでかまわないのではないかと考えられるからである。

数値解の精度で保存しているというので十分かどうかというのは、実は扱う問題によって違ってくる。さらに、同じ問題 (方程式系) であっても、その問題のどの側面を解析したいかによっても変わってくる。実際にどういうことが問題になるかはまた次回ということにして、今日はとりあえず古典力学系向けの方法とはどんなものかということを概観する。

3 2階の微分方程式向きの方法

3.1 Stormer-Cowell 法

さて、前の節ではすこし難しい (というか、抽象的な) 話をしたが、もうちょっと具体的にどんな解法があるのかということを考えてみる。比較的古くから研究され、実用にも使われているのは、2階の微分方程式

$$\begin{aligned} \frac{dv}{dt} &= f(x) \\ \frac{dx}{dt} &= v \end{aligned} \tag{2}$$

に特化した解法である。一般的な方法は、これをそのままいままでに説明してきたいろいろな解法で解くということだが、v は x の微分に過ぎないので、例えば線形多段階法の場合にはこれはちょっと無駄な気がする。つまり、例えばアダムス法で加速度の多項式近似が求まっているとすれば、それを 1 回積分すれば速度の変化量がもとまり 2 回積分すれば位置の変化量がもとまるからである。この考え方に基づく方法を Stormer-Cowell 法という。この方法の場合、普通は

$$x_{i+1} - 2x_i + x_{i-1} = h^2 \sum_{k=-1}^{p} \alpha_k f_{i-k} \tag{3}$$

という形に書いて、v を明示的に変数として持たないことが多いが、これは慣習によるものであまり意味はない。

この方法を普通の方法と比べてみると、計算量 (といっても、f の計算自体は変わらないが)、メモリ必要量とも $1/2$ になっていることがわかる。計算速度等が問題になる場合には、アダムス法ではなくこちらを使うべきであるということはいうまでもないであろう。

この型の公式は高精度が必要な天体の軌道計算などに広く使われている。ここでは 14 次とか 16 次の超高次の公式が使われるのが普通である。

さて、例によってもっとも簡単な場合というのを見てみよう。もっとも簡単なのは右辺が f_iだけの

場合、つまり

$$x_{i+1} - 2x_i + x_{i-1} = h^2 f_i \tag{4}$$

というものであり、これを特に Verlet method ということがある。

この方法は Stormer-Cowell 法のなかでもっとも簡単なものだが、後でみるように非常に特別な性質がありもっとも広く使われている。

3.2 Runge-Kutta-Nystroem 法

ルンゲ・クッタについても同様に 2 階の方程式専用の公式がある。ここでも、計算量が減る他、到達可能次数が一般に 1 階の方程式用の方法よりも高いということが知られている。この型の公式を普通 Runge-Kutta-Nystroem 法と呼ぶ。

陰的な公式の場合は、ガウス公式や Lobatto 公式に比べてよい振舞いをするものはいまのところ知られていない。陽的なものは多数しられていて、かなり良く研究されている。

3.3 外挿法

外挿法についても同様なことを考えられるはずであるが、私の知る限りそのような方法は文献には出てこない。

4 次回の予定

経験によれば、この当たりまで準備しておけば来週までもつであろう。次回は、単に 2 階であるというだけでなくハミルトン力学系であるということ自体を利用する種類の方法を概観する。