

4 次陽的シンプレクティック解法の次数条件

2012SE091 加藤万由子

指導教員：小藤俊幸

1 はじめに

ハミルトン系とは、エネルギー保存の法則が成り立つような物理現象を記述する常微分方程式であり、その解写像はシンプレクティック性と呼ばれる幾何学的性質をもつ。ハミルトン系の数値解法を適用して得られる散力学系が、厳密解と同様にシンプレクティック性を持つことを言う。

一般のハミルトン系では、シンプレクティック解法は、陰的な方法でしか実現できない。しかしハミルトニアンが分離的な場合、すなわち、位置の関数と運動量の関数の和に表される場合に限定すると、陽的なシンプレクティック解法が構成され、様々な観点から高精度の構成が考えられている。次に次数条件に基づく研究から、ルンゲ・クッタ法と同様に、 $s = 1, 2, 3, 4$ については、 s 段で s 次の公式が得られることが知られている。

ルンゲ・クッタ法の場合、次数条件が詳しく調べられ、比較的高次まで、一般解が明らかにされている [1] のに対して、陽的シンプレクティック解法の場合、例えば、4 段 4 次の次数条件式は、2 組の解を持つことが知られている [2] が、それ以外の解を持つかどうかなど、詳しい性質は知られていない。本研究では、4 段 4 次の次数条件を数値解析的な手法で調べることににより、解の構造を明らかにすることを試みる。

2 シンプレクティック数値解法

2.1 シンプレクティック・オイラー法

簡単な例として、実数値関数 $q(t), p(t)$ に関する

$$\frac{dq}{dt} = p, \quad \frac{dp}{dt} = -q \quad (1)$$

の方程式（単振動の方程式）を考える。関数 $H(q, p) = (1/2)(p^2 + q^2)$ をハミルトニアンとするハミルトン系である。この方程式にオイラー法を適用すると、

$$\begin{cases} q_{n+1} = q_n + hp_n \\ p_{n+1} = p_n - hq_n \end{cases} \quad (2)$$

の差分方程式が得られ、これをベクトル、行列を用いて表すと、

$$\begin{bmatrix} q_{n+1} \\ p_{n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & h \\ -h & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} q_n \\ p_n \end{bmatrix} \quad (3)$$

のようになる。右辺の行列の行列式は $1 + h^2$ であることから、(3) によって、 (q_n, p_n) 平面上の図形を (q_{n+1}, p_{n+1}) 平面上にうつすと、面積が必ず $(1 + h^2)$ 倍に拡大される。

また、後退オイラー法を適用すると、

$$\begin{cases} q_{n+1} = q_n + hp_{n+1} \\ p_{n+1} = p_n - hq_{n+1} \end{cases} \quad (4)$$

すなわち、

$$\begin{bmatrix} q_{n+1} \\ p_{n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & -h \\ h & 1 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} q_n \\ p_n \end{bmatrix} \quad (5)$$

が得られ、この式で (q_n, p_n) 平面上の図形を (q_{n+1}, p_{n+1}) 平面上にうつすと、今度は、面積が必ず $(1/(1 + h^2))$ に縮小される。

シンプレクティック・オイラー法は、いわば、両者のバランスを取ったものである。オイラー法 (2) の第 2 式の q_n だけを q_{n+1} で置き換えて、

$$\begin{cases} q_{n+1} = q_n + hp_n \\ p_{n+1} = p_n - hq_{n+1} \end{cases} \quad (6)$$

のようにする。第 1 式を第 2 式に代入すると、 $p_{n+1} = p_n - h(q_n + hp_n) = -hq_n + (1 - h^2)p_n$ となり、(6) は

$$\begin{bmatrix} q_{n+1} \\ p_{n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & h \\ -h & 1 - h^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} q_n \\ p_n \end{bmatrix} \quad (7)$$

のように書き直される。この場合は、行列式の値が 1 となることから、(7) は面積を不変に保つ写像、つまり、シンプレクティック写像となる。このように、ハミルトン系に適用した際の計算式がシンプレクティック写像となるような数値解法のことを、シンプレクティック数値解法と言う。

シンプレクティック・オイラー法は、一般のハミルトン系に対しても適用できるが、陰的解法になる。つまり、近似解を計算する際に、非線形方程式を解く必要があり、実際のプログラミングは、それほど容易ではない。こうした点を避けるため、シンプレクティック・オイラー法の対象を

$$H(q, p) = T(p) + U(q) \quad (q, p \in R^d) \quad (8)$$

の形のハミルトニアンに対するハミルトン系に限ることが多い。

関数 T, U は R^d 全体で定義された C^2 関数とし、 h に依存する写像 $S_Q^h, S_P^h : R^{2d} \rightarrow R^{2d}$ を

$$S_Q^h : \begin{bmatrix} q \\ p \end{bmatrix} \mapsto \begin{bmatrix} q + h\nabla_p T(p) \\ p \end{bmatrix} \quad (9)$$

$$S_P^h : \begin{bmatrix} q \\ p \end{bmatrix} \mapsto \begin{bmatrix} q \\ p - h\nabla_q U(q) \end{bmatrix} \quad (10)$$

により定義する。さらに、 $x_n = [q_n^T, p_n^T]^T$ とおくと、(??) は、合成写像 $S_E^h = S_P^h S_Q^h$ を用いて

$$x_{n+1} = S_E^h(x_n) \quad (11)$$

のように表される。シンプレクティック・オイラー法は、近似精度（解法の次数）の点では、通常のオイラー法と同

等である．記号が繁雑になることを避けるため，

$$f(p) = \nabla_p T(p), \quad g(q) = -\nabla_q U(q) \quad (12)$$

とにおいて，ハミルトン系を

$$\frac{dq}{dt} = f(p), \quad \frac{dp}{dt} = g(q) \quad (13)$$

シンプレクティック・オイラー法を

$$\begin{cases} q_{n+1} = q_n + hf(p_n) \\ p_{n+1} = p_n + hg(q_{n+1}) \end{cases} \quad (14)$$

のように書き直す．

初期条件 $q(t_0) = q_0, p(t_0) = p_0$ をみたく (13) の解を $q(t), p(t)$ とし，

$$q(t_0 + h) - q_1, \quad p(t_0 + h) - p_1 \quad (15)$$

の局所誤差を考える．厳密解は，

$$\frac{d^2 q}{dt^2} = Df(p)g(q), \quad \frac{d^2 p}{dt^2} = Dg(q)f(p)$$

の関係から，

$$\begin{cases} q(t_0 + h) = q_0 + hf(p_0) + \frac{h^2}{2} Df(p_0)g(q_0) + \mathcal{O}(h^3) \\ p(t_0 + h) = p_0 + hg(q_0) + \frac{h^2}{2} Dg(q_0)f(p_0) + \mathcal{O}(h^3) \end{cases} \quad (16)$$

とテイラー展開される．さらに， p_1 は

$$\begin{aligned} p_1 &= p_0 + hg(q_0 + hf(p_0)) \\ &= p_0 + hg(q_0) + h^2 Dg(q_0)f(p_0) + \mathcal{O}(h^3) \end{aligned}$$

のように展開されることから，

$$\begin{cases} q(t_0 + h) - q_1 = \frac{h^2}{2} Df(p_0)g(q_0) + \mathcal{O}(h^3) \\ p(t_0 + h) - p_1 = -\frac{h^2}{2} Dg(q_0)f(p_0) + \mathcal{O}(h^3) \end{cases} \quad (17)$$

が得られる．したがって，局所誤差は $\mathcal{O}(h^2)$ であり，(適切な条件のもとで) 数値解が $\mathcal{O}(h)$ となることが示される．

2.2 写像の合成に基づく高精度化

実際の計算では，解法の収束次数も重要であり，より高い次数をもつシンプレクティック解法が，いくつかの観点から考えられている．

$s (\geq 1)$ を整数とし，

$$b_1, b_2, \dots, b_s, \quad \hat{b}_1, \hat{b}_2, \dots, \hat{b}_s \quad (18)$$

の $2s$ 個の実数を考える．ルンゲ・クッタ法の場合にならって， $b_i, \hat{b}_i$ ($1 \leq i \leq s$) を係数パラメータと呼ぶことにする．各 i に対して，写像 $S_i: R^{2d} \rightarrow R^{2d}$ を (9), (10) 式で定義される写像を用いて，

$$S_i = S_P^{\hat{b}_i h} S_Q^{b_i h} \quad (19)$$

のように定義すると，写像 S_E^h と同様，シンプレクティック写像となる．証明は，シンプレクティック・オイラー法 (??) から定まる写像 (11) は， R^{2d} 上のシンプレクティック写像となることとほとんど同じである．

この S_i を用いて， $x_n = [q_n^T, p_n^T]^T$ から $x_{n+1} = [q_{n+1}^T, p_{n+1}^T]^T$ の計算式を

$$x_{n+1} = S^h(x_n) \quad (S^h = S_s \cdots S_2 S_1) \quad (20)$$

のように与える．ここで， $S_s \cdots S_2 S_1$ は，写像 $S_1, S_2, \dots, S_s$ の合成写像を表し，シンプレクティック写像である．係数パラメータ $b_i, \hat{b}_i$ ($1 \leq i \leq s$) をうまく定めて，(15) の局所誤差が $\mathcal{O}(h^{p+1})$ となるようにすれば， p 次のシンプレクティック解法が得られる．

3 4 段 4 次の次数条件

4 段 4 次の次数条件は次のようになる．

$$b_1 + b_2 + b_3 + b_4 = 1 \quad \textcircled{1}$$

$$\hat{b}_1 + \hat{b}_2 + \hat{b}_3 + \hat{b}_4 = 1 \quad \textcircled{2}$$

$$b_2 \hat{b}_1 + b_3(\hat{b}_1 + \hat{b}_2) + b_4(\hat{b}_1 + \hat{b}_2 + \hat{b}_3) = 1/2 \quad \textcircled{3}$$

$$b_2 \hat{b}_1^2 + b_3(\hat{b}_1 + \hat{b}_2)^2 + b_4(\hat{b}_1 + \hat{b}_2 + \hat{b}_3)^2 = 1/3 \quad \textcircled{4}$$

$$\hat{b}_1 b_1^2 + \hat{b}_2(b_1 + b_2)^2 + \hat{b}_3(b_1 + b_2 + b_3)^2 + \hat{b}_4(b_1 + b_2 + b_3 + b_4)^2 = 1/3 \quad \textcircled{5}$$

$$b_2 \hat{b}_1^3 + b_3(\hat{b}_1 + \hat{b}_2)^3 + b_4(\hat{b}_1 + \hat{b}_2 + \hat{b}_3)^3 = 1/4 \quad \textcircled{6}$$

$$\hat{b}_1 b_1^3 + \hat{b}_2(b_1 + b_2)^3 + \hat{b}_3(b_1 + b_2 + b_3)^3 + \hat{b}_4(b_1 + b_2 + b_3 + b_4)^3 = 1/4 \quad \textcircled{7}$$

$$\begin{aligned} & b_3 \hat{b}_2 b_2 \hat{b}_1 + b_4 \hat{b}_2 b_2 \hat{b}_1 \\ & + b_4 \hat{b}_3 b_2 \hat{b}_1 + b_4 \hat{b}_3 b_3(\hat{b}_1 + \hat{b}_2) = 1/24 \quad \textcircled{8} \end{aligned}$$

4 おわりに

今回の研究で，四次陽的シンプレクティックの解が二つの既知の解以外にないか検証した．mathematica を用い算出した結果，十通りの解が存在した．実数解のみの解が二通り，虚数解を含めた解が八通りである．どの解も必ず b_1 , もしくは $\hat{b}_4$ が 0 であることが共通していた．実数解のみの解は既知と同じであり，新たな解は得られなかった．

参考文献

- [1] J.C. Butcher, The Numerical Analysis of Ordinary Differential Equations, John Wiley & Sons, 1987.
- [2] E.Forest, R.D.Ruth, Forth-order symplectic integration, Physica D vol.43 (1990), pp.107-117.
- [3] 三井 斌友, 小藤 俊幸, 斎藤 善弘, 微分方程式による計算科学入門, 共立出版, 2004.