

長時間積分用のエネルギー保存解法

名古屋大学大学院工学研究科 計算理工学専攻 宮武勇登*

Yuto Miyatake

Department of Computational Science and Engineering,
Graduate School of Engineering, Nagoya University

1 はじめに

本稿では、常微分方程式の初期値問題に対する構造保存数値解法の一つである「エネルギー保存解法」について述べる。

微分方程式の数値解法のうち、解くべき微分方程式が持つ何らかの構造を離散系でも再現する数値解法のことを「構造保存数値解法」と呼ぶ ([1, 10, 13, 16, 20])。これは 1980 年代に興った数値解析の一分野であり、対象の方程式群を限定しその背後にある構造を数値解法に取り込むことで、Runge-Kutta 法や線形多段階法といった汎用解法よりも優れた解法を作る試みである。方程式群をやや限定する分だけ汎用解法よりも優れている（ことが期待されている）一方、天文学における Störmer 法（1907 年）や分子動力学における Verlet 法（1967 年）のように分野や方程式が限られる専用解法と比較すると対象の方程式群は広い。この意味で、構造保存数値解法は汎用解法と専用解法の間位置付けられる*1。

構造保存数値解法では適切な問題クラスの設定が肝心であるが、本稿では「Hamilton 系」:

$$\frac{d}{dt}y = J^{-1}\nabla H(y), \quad y(t_0) = y_0 \in \mathbb{R}^N$$

を考える*2。ここで、 J は正則な歪対称行列とする。多くの場合、 y は一般化座標 $q: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^d$ および運動量 $p: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^d$ を用いて $y = (q, p)^\top$ と書け（すなわち $N = 2d$ ）、さらに

$$J = \begin{pmatrix} O & -I \\ I & O \end{pmatrix}$$

である ($O, I \in \mathbb{R}^{d \times d}$ はそれぞれ零行列、単位行列)。Hamilton 系は Hamilton 力学によって導出されるため多くの数理解法を持つが、ここでは代表的な二性質を述べる。まず、Hamilton 系を解いて得られるフロア: $\phi_h: \mathbb{R}^N \ni y(t) \mapsto y(t+h) \in \mathbb{R}^N$ は symplectic 写像である:

$$\left(\frac{\partial \phi_h}{\partial y}\right)^\top J \left(\frac{\partial \phi_h}{\partial y}\right) = J. \quad (1)$$

次に、Hamiltonian H は保存量である:

$$\frac{d}{dt}H(y(t)) = \nabla H(y(t))^\top \frac{d}{dt}y = \nabla H(y(t))^\top J^{-1}\nabla H(y(t)) = 0. \quad (2)$$

本稿では、この第二の性質をエネルギー保存則と呼ぶ。これらの性質を再現する構造保存数値解法は、それぞれ symplectic 解法、エネルギー保存解法と呼ばれている*3。

*miyatake@na.nuap.nagoya-u.ac.jp

*1但し、汎用解法と構造保存数値解法、あるいは構造保存数値解法と専用解法の間明確な区別があるわけではない。例えば、現在では、半世紀近く前から知られていた陰的 Runge-Kutta 法の公式の幾つかは後述の symplectic 解法であることが認識されている。他方、Störmer 法や Verlet 法も symplectic 解法であり、また本質的に同じ解法であることから、構造保存数値解法の文脈ではしばしば Störmer-Verlet 法と呼ばれる。

*2Hamilton 系は一般の微分方程式と比べるとやや対象が限定されるものの、古典力学だけでなく量子力学でも現れるように特定の分野や現象に注目しているわけではなく、Hamilton 系に対する数値解法の開発は一定の水準の汎用性を期待できる。本稿では触れないが、他にも勾配系、多様体上の微分方程式、高振動系、変分構造を持つ偏微分方程式などが構造保存数値解法の研究対象の代表例である。

*3構造保存数値解法では、より多くの構造を同時に再現する数値解法が望ましいが、symplectic 性とエネルギー保存性の両立は特殊な場合 ($f(y)$ が線形) を除いて不可能であることが知られている [25]。

構造保存数値解法の代表的な特徴の一つに、優れた長時間挙動が挙げられる^{*4}。まず symplectic 解法について考えると、その優れた長時間挙動は「後退誤差解析」と呼ばれる解析手法を用いて詳しく理解されている。ところが、エネルギー保存解法はそもそも数値解に対してたった一つ自由度を拘束するに過ぎないため、多くの方法で実現することができ、その実現方法によって数値解の性質は大きく異なることが知られている。そのため、使用するエネルギー保存解法の選択には注意を要する。近年、経験的に良い長時間挙動を示すことの多いエネルギー保存解法についてその理由が解明されつつあり、本稿ではその内容を概観する。

エネルギー保存解法の解析でも後退誤差解析が鍵になるため、まず 2 節で symplectic 解法とそれに対する後退誤差解析のアイデアを紹介し、3 節でエネルギー保存解法に対する近年の解析を概観する。最後に 4 節で関連する幾つかの話題を述べる（但し、本稿では Hamilton 系に対するエネルギー保存解法しか扱わないため、構造保存数値解法分野としての今後の展望等に関しては例えば [15] や本講究録 [17] を参照）。なお、ユーザーの視点に立てば、エネルギー保存解法同士の比較だけでなく、そもそも symplectic 解法とエネルギー保存解法の選択基準も重要である。これらは一般にどちらが優位と言い切れるものではなく、状況に応じた選択が重要である。この観点は本稿の主眼ではないが、3 節の冒頭で両者の違い（例えば [13, Chapter VIII] や [22] を参照）を簡単に紹介する。

本稿では、数値解を $y^{(m)} \simeq y(t_0 + mh)$ (h は刻み幅) と書く。時刻 $t = t_0$ ($m = 0$) では初期値が与えられているとする。また、本稿で示す数値実験は Kepler 問題

$$\frac{d}{dt}q_1 = p_1, \quad \frac{d}{dt}q_2 = p_2, \quad \frac{d}{dt}p_1 = -\frac{q_1}{(q_1^2 + q_2^2)^{3/2}}, \quad \frac{d}{dt}p_2 = -\frac{q_2}{(q_1^2 + q_2^2)^{3/2}}$$

を対象としたものである^{*5}。但し、初期値は $q_1(0) = 0.4$, $q_2(0) = 0$, $p_1(0) = 0$, $p_2(0) = 2$ とする。

2 Symplectic 解法

エネルギー保存解法の議論に先立ち、symplectic 解法の長時間挙動について考える。Symplectic 解法の長時間挙動は後退誤差解析によって既によく理解されており、本節では後退誤差解析の要点を整理する。

まず、symplectic 解法の定義と例を挙げる。ある数値解法が symplectic であるとは、それが定義する時間発展写像が symplectic であることを言う。一例を挙げよう。Symplectic Euler 法は

$$\frac{1}{h} \begin{pmatrix} q^{(m+1)} - q^{(m)} \\ p^{(m+1)} - p^{(m)} \end{pmatrix} = J^{-1} \begin{pmatrix} \nabla_q H(q^{(m)}, p^{(m+1)}) \\ \nabla_p H(q^{(m)}, p^{(m+1)}) \end{pmatrix}, \quad m = 0, 1, 2, \dots$$

と表現される公式であり、これが symplectic 解法であることは、この公式の定める写像の Jacobian を計算し条件 (1) を満たすことを確認することによって示される。他にも、Runge-Kutta 法はある条件を満たせば symplectic であることが知られているなど^{*6}、現在では多くの symplectic 解法が知られている。

次に、Kepler 問題に対する数値例を通して symplectic 解法の特徴を示す。よく知られているように、Kepler (の二体) 問題は一体を原点に固定したときのもう一体の運動を記述し、適切な初期条件のもとで厳密解は楕円軌道となるが、特に離心率が大きい場合の数値計算は困難であるため、常微分方程式の数値解法のベンチマーク問題としてよく利用される。実際、汎用解法を用いると、たとえ高精度解法であったとしても、楕円軸が大きく回転する、エネルギーが単調に増大する、軌道の大きさも回転ごとに拡大するといった問題が生じる。図. 1 は、symplectic Euler 法を用いて Kepler 問題を 10 周期程度数値計算した結果である。左図からは楕円軌道からのずれがあまり無いことが読み取れる。また、右図は数値解のエネルギー変化を示したものであり、エネルギーは厳密値 -0.5 からずれてはいるものの、ずれは一定の幅で抑えられている様子が観察される。この数値例では、右図の挙動を強調するために比較的短い時間の結果を描画しているが、

^{*4}「長時間」がどのくらい長い時間を指すかは解法や問題ごとに異なるため明確な定義はないが、本稿では、汎用解法では太刀打ちしない実用上十分な長い時間という意味で用いている。

^{*5}Kepler 問題は $y = (q_1, q_2, p_1, p_2)^T$ と表記した時、 $H(y) = \frac{p_1^2 + p_2^2}{2} - \frac{1}{\sqrt{q_1^2 + q_2^2}}$ に対応する Hamilton 系である。

^{*6}但し、symplectic Runge-Kutta 法は必ず陰解法である。従って 4 段 4 次 Runge-Kutta 法に代表される汎用的な陽的 Runge-Kutta 法は symplectic 解法には成りえない。

例えば $t \in [0, 2000\pi]$ といったスケールでも値は常に -0.55 から -0.45 の範囲に収まる。実は、この「エネルギーのずれ幅が拡大しない」性質は、Hamilton 系を symplectic 解法で数値計算する際によく観察される特徴的な性質である。

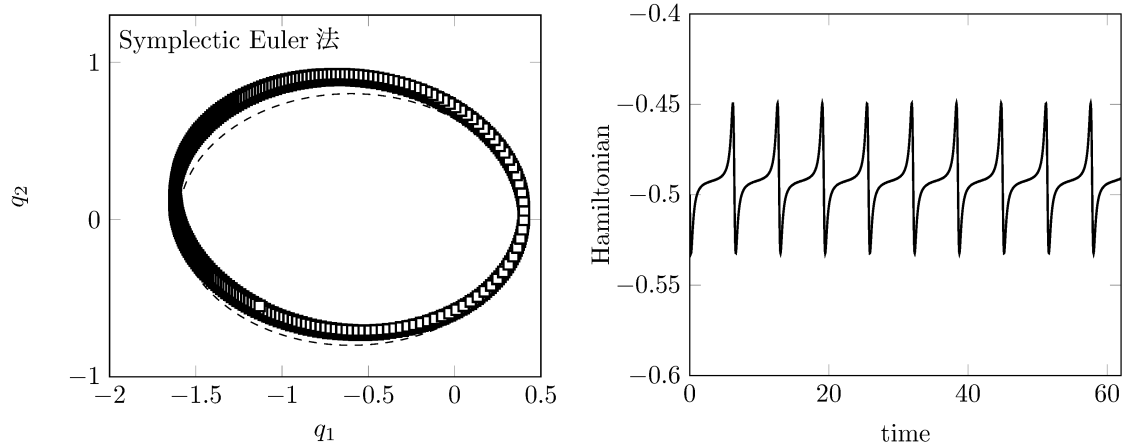


図 1: Symplectic Euler 法による Kepler 問題の数値解。パラメータは $h = 0.03$, $t \in [0, 20\pi]$ 。左図の破線 (楕円) は厳密解の軌道。右図は数値解のエネルギー変化 (厳密な値は -0.5)。

この優れた (そして一見不思議な) 現象は、後退誤差解析によって説明できる。通常、微分方程式の誤差解析では $\|y(t) - y_m\| = \mathcal{O}(h^p)$ のタイプの評価を行うことが多い^{*7}。一方で、形式的に

$$\frac{d}{dt}y = f(y) + hf_1(y) + h^2f_2(y) + \dots \quad (3)$$

という形の微分方程式を考え、数値解が微分方程式 (3) の厳密解と一致するように f_1, f_2, \dots を決定していくことができる。この方程式 (3) は修正方程式と呼ばれ、後退誤差解析ではこの修正方程式を考察する。一般に、 p 次精度の数値解法に対する修正方程式は、 $f_1 = \dots = f_{p-1} = 0$ となることが知られているが、 f_p, f_{p+1}, \dots については非常に複雑な形になり、そこから有意な情報を取り出すことは難しい。これらは $\mathcal{O}(h^p)$ の摂動であるため、比較的短い時間スケールではその影響は少ないが、時間発展に伴い徐々に支配的になり、長時間挙動を悪化させる。しかし、symplectic 解法については、やはり f_p, f_{p+1}, \dots の具体的表現は複雑なもの、任意の $i \geq p$ に対して $f_i = J^{-1}\nabla H_i(y)$ となる関数 H_i が存在する。

定理 1 ([13, IX.3, Th.3.1]). 滑らかな Hamiltonian で定義された Hamilton 系に、ある p 次精度の symplectic 解法を適用したとする。このとき、解法により定まるある滑らかな関数列 $\{H_j\}$ ($j = p, p+1, \dots$) が存在して、symplectic 解法による積分結果は、「陰の Hamiltonian」:

$$\tilde{H}(y) = H(y) + h^p H_p(y) + h^{p+1} H_{p+1}(y) + \dots \quad (4)$$

で定まる Hamilton 系を厳密に積分したものと一致する。

要するに、symplectic 解法は Hamilton 系を Hamilton 系で近似する。すなわち、symplectic 解法は元の Hamilton 系に良く似た (小さな摂動の加わった) Hamilton 系を厳密に積分しており、これが優れた長時間挙動を示す最大の理由と解釈されている。この定理の帰結として $H(y_m) - H(y_0) = \mathcal{O}(h^p)$ が成り立ち、図 1 (右図) で観察された現象が説明できる。

注意 2. 定理 1 では級数 (4) の収束性の議論はしていない。より厳密な定理は [13, IX.8] を参照のこと。また、個々の問題には言及しておらず、あくまで任意の Hamilton 系と任意の symplectic 解法に対する形式的な解析である。しかし、数値解のエネルギー変化を明解に説明できる「修正方程式が必ず Hamilton 系である」という主張の意義は大きい。

^{*7}この意味で、symplectic Euler 法は 1 次精度 ($p = 1$) の解法である。

3 エネルギー保存解法

本節では、Hamilton 系に対するエネルギー保存解法について述べる。まず、symplectic 解法とエネルギー保存解法の代表的な特徴を述べておこう。初めの二点がエネルギー保存解法に対する symplectic 解法の利点であり、後の二点がエネルギー保存解法の利点 (symplectic 解法の欠点) である。

- 前節で述べたように symplectic 解法の長時間挙動はよく理解されているが、そもそもエネルギー保存解法はその実現方法によって挙動が大きく異なり、また、経験的に良いエネルギー保存解法についても、ある程度良い挙動が保証される時間は symplectic 解法と比べると短い (本節末尾参照)。
- Symplectic 解法の多くは陰解法だが、Hamiltonian が可分な場合: $H(q, p) = T(p) + V(q)$ には前述の symplectic Euler 解法をはじめとして幾つかの symplectic 解法は陽解法になる。一方、エネルギー保存解法にはそのような利点は見られず、方程式の形に依らず陰解法である。
- Symplectic 解法に対する後退誤差解析は、一定の刻み幅を使い続けることを前提としている。従って、適応刻み幅制御を適用すると後退誤差解析は成立せず、Hamilton 系を Hamilton 系で近似するという性質は保証されない。実際に数値実験を行うと、エネルギーの誤差が単調に増えていく様子がしばしば観察される ([13, VIII.1] では「Dangers of Using Standard Step Size Control」という節題で、適応刻み幅制御の適用の問題点が議論されている)。
- Symplectic 解法による数値解のエネルギーの誤差は、小さな幅で抑えられるとはいえ、それは計算機イプシロンからみると大きな値であるとも言える。実際、エネルギーの誤差が致命的になる例もいくつか報告されている (例えば [22] では、Hénon-Heiles 方程式に対して symplectic Euler 法を適用した際、不安定平衡点の近くでエネルギーの誤差がずれることの危険性を例示している)。

その他、エネルギー保存解法には、3.2 節 (離散勾配法) と同様のアイデアを用いると、エネルギー散逸系に対して散逸解法を容易に構築できるといった利点もある。

さて、前述の通り、エネルギー保存解法は数値解に対してたった一つ自由度を制限するだけで実現できるため、実に様々な方法が考えられる。これは比較的容易に解法を構築できると捉えられる一方、良い解法を見つけることの困難さを意味している^{*8}。素朴な方法の代表格には射影法の応用があり、3.1 節で紹介する。一方、経験的に良い性質の数値解を得られることの多い解法が、3.2 節で紹介する離散勾配法 (その中でも特に average vector field 法) である。これらの解法を紹介した後、3.3 節で average vector field 法およびその拡張法の長時間挙動に関する近年の解析を概観する。

3.1 射影法

射影法について述べる。まず、 \mathbb{R}^N の $N-1$ 次元部分多様体を $\mathcal{M} = \{y; H(y) = H(y_0)\}$ で定義する。このとき、我々の目的は、厳密解と同様に数値解も \mathcal{M} に制限される数値解法: $\mathcal{M} \ni y^{(m)} \mapsto y^{(m+1)} \in \mathcal{M}$ の構築であるが、これは以下の様な二ステップで実現できる。

1. $\dot{y} = f(y)$ に対する任意の一段階法 $\Phi_h: \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}^N$ を用いて、 $\tilde{y}^{(m+1)} = \Phi_h(y^{(m)})$ を計算する;
2. $\tilde{y}^{(m+1)}$ を \mathcal{M} に射影し、 $y^{(m+1)} \in \mathcal{M}$ を求める。

このように射影法を利用したエネルギー保存解法には次のような利点がある。

- ニステップまとめて一段階法と捉えた時、その精度は Φ_h の精度と一致する。

^{*8}Symplectic 解法では、公式そのものは symplectic 性が重要視される以前から発見されていたものも多い。ところが、エネルギー保存解法の研究では、古くから知られていた解法が実はエネルギー保存解法だったというようなことはない。また、Runge-Kutta 法はエネルギー保存解法にはなりえないことが知られているなど、良く知られた数値解法の枠組みでエネルギー保存解法の構築は困難である (但し、これは「任意の Hamilton 系に対して」の主張であり、特定の Hamilton 系に対してはエネルギーを厳密に保存する Runge-Kutta 法を構築できる (場合がある) こともあり、エネルギー保存解法と言ったとき、任意の Hamilton 系を対象にしているのか、あるいは特定の Hamilton 系を対象にしているのか注意が必要である) [6]。

- 微分方程式が複数の保存量を保つ場合、 M の定義を修正すれば、(以下で述べる離散勾配法などと比べて) 比較的容易に複数保存量を再現できる。

一方で、射影法はエネルギー保存性をいわば強引に再現したものであり、長時間挙動については未知のことも多い。例えば、 Φ_h 単体で計算した場合と比較して、射影を組合せた結果、安定性などの数値解の性質が著しく悪化することがあり、この方法の利用には注意が必要である。

3.2 離散勾配法

次に、離散勾配法について述べる。離散勾配法では、Hamiltonian H の勾配 $\nabla H(y)$ を次の定義を満たす離散勾配で近似する。

定義 3 (離散勾配). N を自然数とし、ある関数 $H: \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}$ を考える。このとき、任意の $x, y \in \mathbb{R}^N$ に対して次を満たす離散量 $\bar{\nabla}H: \mathbb{R}^N \times \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}$ が存在するとき、それを H の「離散勾配」と呼ぶ。

- $H(x) - H(y) = \bar{\nabla}H(x, y)^\top (x - y)$,
- $\bar{\nabla}H(x, x) = \nabla H(x)$.

ここで、最初の条件が「離散連鎖律」と呼ばれるもので本質的である。二番目の条件は、連続版の勾配の近似になっていることの要請に過ぎない。

具体的な離散勾配の求め方はさておき、Hamilton 系を定義する Hamiltonian H に対して離散勾配が見つかれば、数値計算スキームを

$$\frac{y^{(m+1)} - y^{(m)}}{h} = J^{-1} \bar{\nabla}H(y^{(m+1)}, y^{(m)}), \quad m = 0, 1, 2, \dots$$

と定義すると、このスキームは自明にエネルギー保存解法となっている。実際、連続の場合 (2) と同様に

$$\begin{aligned} H(y^{(m+1)}) - H(y^{(m)}) &= \bar{\nabla}H(y^{(m+1)}, y^{(m)})^\top (y^{(m+1)} - y^{(m)}) \\ &= h \bar{\nabla}H(y^{(m+1)}, y^{(m)})^\top J^{-1} \bar{\nabla}H(y^{(m+1)}, y^{(m)})^\top = 0 \end{aligned}$$

と容易に確認できる (第一の等号は離散連鎖律による)。

離散勾配法を常微分方程式の数値解析の文脈で最初に定式化したのは Gonzalez[11] だが、類似のアイデアは 1970 年代から知られていたようである。さて、離散勾配の見つけ方についてだが、やはり多くの自由度が存在する。それらの中でも、現在では、後述の理由もあり Quispel–McLaren による Average vector field (AVF) 法 [22]

$$\bar{\nabla}H(y^{(m+1)}, y^{(m)}) = \int_0^1 \nabla H((1 - \tau)y^{(m)} + \tau y^{(m+1)}) d\tau$$

が最もよく用いられる。AVF 法は、 $\frac{d}{dt}y = f(y)$ に対する数値計算公式として、しばしば

$$y^{(m+1)} = y^{(m)} + h \int_0^1 f((1 - \tau)y^{(m)} + \tau y^{(m+1)}) d\tau, \quad m = 0, 1, 2, \dots \quad (5)$$

と標記される (従って、AVF 法は任意の微分方程式に適用可能で、Hamilton 系に適用した場合には自動的にエネルギー保存解法となる)。AVF 法は対称 (\rightarrow 数値解法の対称性については [13] を参照) な 2 次精度のエネルギー保存解法であり、2010 年頃からは AVF 法の高精度化が提案されている。拡張法は Hairer による AVF 選点法 [12] と、Brugnano 等による Hamiltonian boundary value 法 [2] の二通りあるが、数値計算公式そのものは数学的に同等である。

ここで、Kepler 問題を通して射影法と AVF 法の比較を行う。図. 2 は射影法 (symplectic Euler 法 + 射影) と AVF 法による数値解の様子を描画したものだが、明らかに AVF 法の方が定性的挙動に優れている。

射影法はエネルギーを保存しているという意味での安定性はあるものの、そのことが必ずしも良い定性的挙動にはつながらないことが考察できる。さらに、射影法は一般に任意の数値解法と組合せられるが、この例のように symplectic Euler 法との組合せでも symplectic Euler 法単体の数値計算よりも数値解の性質は悪化しており、個々の方程式に対してよほど相性の良い数値解法と射影法を組合せない限り、良い長時間挙動は期待できない。

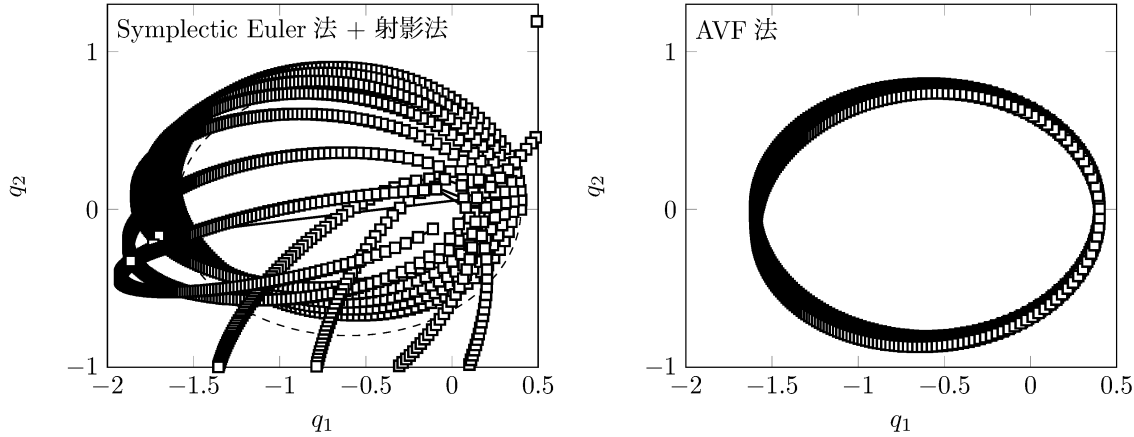


図 2: Kepler 問題の数値解：(左図) symplectic Euler 法と射影法の組合せ, (右図) AVF 法. パラメータは $h = 0.03$, $t \in [0, 20\pi]$.

3.3 Conjugate symplectic 性

以上の例で見たように, AVF 法 (および AVF 選点法) は射影法等と比較して長時間挙動に優れていることが多いが, 近年その理由が解明されつつあり [12, 14], ここではその議論を紹介する. 解析の鍵は, symplectic 解法に対する解析の場合と同様に後退誤差解析であり, 修正方程式がどの程度 Hamilton 系に近い形をしているかを議論する. 但し, 正面切って修正方程式を考察するのではなく, symplectic 解法とのある種の近さを表現する conjugate symplectic 性を介した議論を行う^{*9}.

まず, 異なる二つの (一段) 解法同士のある種の「近さ」を表現する conjugate 性の定義を紹介する.

定義 4 ([13, Chapter VI]). 二つの異なる一段階法 Φ_h, Ψ_h に対して, ある座標変換 χ_h (但し, $\chi_h(y) = y + \mathcal{O}(h)$) が存在し,

$$\Phi_h = \chi_h^{-1} \circ \Psi_h \circ \chi_h$$

と表現できるとき, 二解法は conjugate であるという.

この定義より直ちに $\Phi_h^n = \chi_h^{-1} \circ \Psi_h^n \circ \chi_h$ が導かれ^{*10}, conjugate な二解法は長時間非常によく似た挙動を示すと考察できる. 典型例には, 中点則と台形則があり, 台形則は symplectic 解法ではないが, symplectic 解法である中点則とよく似た挙動を示す. ここで, AVF 法のような (経験的に) 優れたエネルギー保存解法は symplectic 解法と conjugate な関係であれば優れた長時間挙動の理由も明解であるが, 実際には symplectic 解法と conjugate な関係にはなっていない. それどころか, symplectic 解法と conjugate なエネルギー保存解法が存在するか否かは, 現在でも未解決である.

そこで, 上記の定義を少し緩めて次の定義を考える. なお, 紙面の都合上, 次の定義では二解法のうち片方を symplectic 解法に限定する.

^{*9}AVF 法や AVF 選点法のみを考察するのであれば直接修正方程式を考えれば良いが, ここで紹介する解析は B-級数法と呼ばれる解法に対して適用できる. B-級数法 (例えば [13, III] を参照) とは, Runge-Kutta 法や AVF 選点法を含む広範の数値解法を記述できる枠組みであり (但し, 3.1 節の射影法はこの枠組みには入らない), 様々な数値解法の長時間挙動を議論できる.

^{*10} $\Phi_h^n := \Phi_h \circ \dots \circ \Phi_h$ (n 写像の合成).

定義 5 ([13, Chapter VI]) p 次精度の一段階法 Φ_h に対して, 同じ精度のある symplectic 解法 Ψ_h および座標変換 χ_h (但し, $\chi_h(y) = y + \mathcal{O}(h)$) が存在し,

$$\Phi_h(y) = (\chi_h^{-1} \circ \Psi_h \circ \chi_h)(y) + \mathcal{O}(h^{p+r+1})$$

と表現できるとき, Φ_h を $p+r$ ($r \geq 0$) 次の conjugate symplectic 解法という.

このような定義を考えると, 実は AVF 法 (およびその拡張の AVF 選点法) は $p+2$ 次 (すなわち $r=2$) の conjugate symplectic 解法であることが知られている [12]

以下, ある p 次精度の数値解法が $p+r$ 次の conjugate symplectic 解法であることの意義を後退誤差解析 (修正方程式) の観点から解説する. $p+r$ 次の conjugate symplectic 解法 Φ_h の修正方程式は, symplectic 解法の場合のように Hamilton 系にはならないものの, $p+r$ 次の項までは Hamilton 系の形となる. 数式で言い換えると, 修正方程式 (3) の f_i に対して H_p, \dots, H_{p+r-1} が存在し,

$$f_1 = \dots = f_{p-1} = 0, \quad f_i(y) = J^{-1} \nabla H_i(y) \quad (i = p, \dots, p+r-1)$$

となる (一方で f_{p+r} はこのような形にはならない) その帰結として, 大凡 $t \in [t_0, t_0 + h^{-r}]$ の範囲であれば Φ_h と Ψ_h は似た挙動を示すと考察できる. これより先の時間では, 勾配の形で表せない f_{p+r} , の項による影響が無視できなくなり, 長時間挙動の保証は困難になる. 従って,

- r が大きいほど 同じ精度 (同じ p) の symplectic 解法と同程度の性質の数値解が保証される時間幅が大きくなる
- $p+r$ が大きいほど, 「Hamilton 系を Hamilton 系で近似する」という symplectic 解法の長時間挙動の本質に近づく

ことが考察できる.

以上をまとめると, 射影法をはじめとする多くのエネルギー保存解法は conjugate symplectic 解法ではなく AVF 選点法は $p+2$ 次の conjugate symplectic 解法である. この違いが 経験的に知られていた長時間挙動の差に繋がっている.

一方で, 現状の解析では次のような問題も残されている. 上記の考察に基づくと, AVF 選点法 [12] は任意の偶数次精度を達成できるが 上の定義における r の値は常に $r=2$ であり, 従って同じ精度 (同じ p) の symplectic 解法と同程度の長時間挙動が保証される時間幅は $[t_0, t_0 + h^{-2}]$ である. 構造保存数値解法は比較的大きな刻み幅を使用できることを謳っており, $r=2$ は小さすぎる印象もある. もっとも, 経験的にはさらに長時間にわたって良い挙動が観察されることが多く その詳細な解明には至っていない

4 まとめとその他の話題

本稿では, Hamilton 系に対するエネルギー保存解法の長時間挙動について, 主に数学的な側面から研究の現状を概観した

離散の世界でエネルギー保存性を厳密に再現するには幾つかの方法があるが 射影法のような比較的素朴な方法を使うか AVF 法 (または AVF 選点法) を使うかによって数値解の挙動, 特に長時間挙動には大きな差が観察されることが多い 現状では conjugate symplectic 性といった概念を通じた後退誤差解析によって, AVF 法亜種の良い長時間挙動が解明されつつあるが 前節末尾で述べたように現状の解析と経験の間には依然として乖離がある.

関連する話題

最後に 全てを網羅することはできないが 直近 5 年間程度になされた Hamilton 系に対するエネルギー保存解法の研究の幾つかを紹介する.

本稿では AVF 選点法の具体形を省略したが、既に AVF 法 (5) の時点で見られるように、公式の中に積分が現れる。この積分をどの段階（事前に計算しておくのか数値積分するのか等）で評価するべきかは自明ではなく、幾つかの研究がある。例えば、Brugnano 等は Hamiltonian が多項式の場合に対して AVF 選点法の効率的な実装方法を示している [3]。また本稿著者らは、無段式 Runge–Kutta 法と呼ばれる枠組の数値解法がエネルギー保存解法となるための十分条件を示し [21] ([24] でも本質的に同じ条件が示されている)、その条件を利用して並列計算の観点からより効率的な新しいエネルギー保存解法を構築した [5]。またこの条件を利用すると、 $r > 2$ となる conjugate symplectic 解法を構築することもできる。なお、無段式 Runge–Kutta 法のエネルギー保存条件については、十分条件は明確に示されているが、必要条件はある種の仮定のもとでしか示されていない。

本稿では、エネルギーとは Hamilton 系を定義する Hamiltonian を指していたが、系によっては複数の保存量を持つことがある（例えば、Kepler 問題は Hamiltonian 以外に angular momentum, Runge–Lenz ベクトルと呼ばれる保存量を持つ）。複数の保存量を再現する数値解法も 1990 年代後半より研究が行われており、近年でも幾つかの進展があるが（例えば [4, 9]）、多少なりとも射影法に似たアイデアを用いる事が多く、Hamiltonian のみを再現するエネルギー保存解法と比べて優位であるとは言い切れず、良い解法の構築および解法の解析の両面で今後の進展が期待される。

一般に、エネルギー保存解法の実装では非線形方程式を解く必要があり（解くべき非線形方程式のサイズは異なるが射影法でも AVF 法でも必要）、不動点反復や Newton 法のような非線形ソルバがよく用いられる。非線形方程式を解く計算コストを削減するため、そもそも離散の世界のエネルギーを多段ステップで定義することで線形なエネルギー保存多段スキームを構築するアイデアがあり [8, 18]、良い長時間挙動を示すことも多い。近年、エネルギー散逸系に対してこの種の線形多段階法の安定性解析がなされているが [19, 23]、現状では Hamilton (保存) 系に対する長時間挙動の解析で大きな進展はないように思われる。

保存量を伴う微分方程式は Hamilton 系には限らない。Cohen–Hairer は AVF 選点法を Poisson 系: $\frac{d}{dt}y = S(y)\nabla H(y)$ に拡張した [7] (但し、 $S(y)$ は y に依存する歪対称行列)。この結果は直ちに偏微分方程式に対するエネルギー保存解法である離散変分導関数法 [10] の時間離散化パートに適用できる。数値実験では良い長時間挙動を示すことが多いが、その解析はまだなされていない。

参考文献

- [1] C. Budd and M. D. Piggott: Geometric integration and its applications, in *Handbook of Numerical Analysis*, XI, North-Holland, Amsterdam, 2003, 35–139.
- [2] L. Brugnano, F. Iavernaro and D. Trigiante: Hamiltonian boundary value methods (energy preserving discrete line integral methods), *J. Numer. Anal. Ind. Appl. Math.*, **5** (2010), 17–37.
- [3] L. Brugnano, F. Iavernaro and D. Trigiante: A note on the efficient implementation of Hamiltonian BVMs, *J. Comput. Appl. Math.*, **236** (2011), 375–383.
- [4] L. Brugnano and Y. Sun: Multiple invariants conserving Runge–Kutta type methods for Hamiltonian problems, *Numer. Algor.*, **65** (2014), 611–632.
- [5] J. C. Butcher and Y. Miyatake: A characterization of energy-preserving methods and the construction of parallel integrators for Hamiltonian systems, submitted (arXiv:1505.02537).
- [6] E. Celledoni, R. I. McLachlan, D. I. McLaren, B. Owren, G. R. W. Quispel and W. M. Wright: Energy-preserving Runge–Kutta methods, *ESIAM Math. Model. Numer. Anal.*, **43** (2009), 645–649.
- [7] D. Cohen and E. Hairer: Linear energy-preserving integrators for Poisson systems, *BIT*, **51** (2011), 91–101.

- [8] M. Dahlby and B. Owren: A general framework for deriving integral preserving numerical methods for PDEs, *SIAM J. Sci. Comput.* **33** (2011), 2318–2340.
- [9] M. Dahlby, B. Owren and T. Yaguchi: Preserving multiple first integrals by discrete gradients, *J. Phys. A*, **44** (2011), 305205.
- [10] D. Furihata and T. Matsuo: *Discrete Variational Derivative Method: A Structure-Preserving Numerical Method for Partial Differential Equations*, CRC Press, Boca Raton, 2011.
- [11] O. Gonzalez: Time integration and discrete Hamiltonian systems, *J. Nonlinear Sci.*, **6** (1996), 449–467.
- [12] E. Hairer: Energy-preserving variant of collocation methods, *J. Numer. Anal. Ind. Appl. Math.*, **5** (2010), 73–84.
- [13] E. Hairer, C. Lubich and G. Wanner: *Geometric Numerical Integration* (2nd ed.), Springer-Verlag, Heidelberg, 2006.
- [14] E. Hairer and C. J. Zbinden: On conjugate symplecticity of B-series integrators, *IMA J. Numer. Anal.*, **33** (2013), 57–79.
- [15] A. Iserles and G. R. W. Quispel: Why geometric numerical integration? (arXiv:1602.07755).
- [16] B. Leimkuhler and S. Reich: *Simulating Hamiltonian Dynamics*, Cambridge University Press, Cambridge, 2004.
- [17] 松尾宇泰: 数値計算における「構造保存」の考え方について, 本講究録掲載予定.
- [18] T. Matsuo and D. Furihata: Dissipative or conservative finite-difference schemes for complex-valued nonlinear partial differential equations, *J. Comput. Phys.*, **171** (2001), 425–447.
- [19] T. Matsuo and D. Furihata: A stabilization of multistep linearly implicit schemes for dissipative systems, *J. Comput. Appl. Math.*, **264** (2014), 38–48.
- [20] 松尾宇泰, 宮武勇登: 微分方程式に対する構造保存数値解法, *日本応用数学会論文誌*, **22** (2012), 213–251.
- [21] Y. Miyatake: An energy-preserving exponentially-fitted continuous stage Runge–Kutta method for Hamiltonian systems, *BIT*, **54** (2011), 777–799.
- [22] G. R. W. Quispel and D. I. McLaren: A new class of energy-preserving numerical integration for Hamiltonian systems, *J. Phys. A*, **41** (2008), 045206.
- [23] S. Sato, T. Matsuo and D. Furihata: An analysis on the asymptotic behavior of multistep linearly implicit schemes for the Duffing equation, *JSIAM Lett.*, **7** (2015), 45–48.
- [24] W. Tang and Y. Sun: Construction of Runge–Kutta type methods for solving ordinary differential equations, *Appl. Math. Comput.*, **234** (2014), 179–191.
- [25] G. Zhong and J. E. Marsden: Lie–Poisson Hamilton–Jacobi theory and Lie–Poisson integrators, *Phys. Lett. A*, **133** (1988), 134–139.