

可変時間ステップによるシンプレクティック数値解法

国立天文台 吉田春夫 (Yoshida Haruo)

1 はじめに

調和振動子、ケプラー問題などに代表されるハミルトン系を 4 次のルンゲ・クッタ法などの通常の汎用数値解法を用いて解くと、打ち切り誤差の集積が原因となって起こるエネルギーの励起、減衰が起こる。そしてとりわけ長時間の数値積分の結果の信頼性を失わせる。このことはより高次の、可変ステップの数値解法を用いても、打ち切り誤差の影響が無視できない限り同様である。そこでハミルトン系のみにも適用できる専用の数値解法が望まれることになる。

ハミルトン力学系

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

は時間発展 $(q(0), p(0)) \rightarrow (q(\tau), p(\tau))$ がエネルギーの値を保存する ($H(p, q) = \text{const.}$) 以外に変換がシンプレクティック (symplectic) である ($dp \wedge dq = \text{const.}$) という性質を持つ。このシンプレクティック性は自由度 1 の系 (2 次元写像) においては面積保存と等価である。一般のハミルトン系に対して $H(p, q) = \text{const.}$ と $dp \wedge dq = \text{const.}$ を同時に満足する数値解法は Ge and Marsden (1988) により存在しない。表題のシンプレクティック数値解法とは各ステップ $(q_n, p_n) \rightarrow (q_{n+1}, p_{n+1})$ が厳密にシンプレクティック写像となるものとして定義される。そしてエネルギーの保存に関しても優れた特長を有する。

2 調和振動子の例

最も単純な例として 1 次元の調和振動子

$$\frac{dq}{dt} = p, \quad \frac{dp}{dt} = -q, \quad H = \frac{1}{2}(p^2 + q^2) \quad (2)$$

を考える。1 次の汎用数値解法であるオイラー法は写像

$$q_{n+1} = q_n + \tau p_n, \quad p_{n+1} = p_n - \tau q_n \quad (3)$$

を与え、エネルギー値は各ステップごとに $(1+\tau^2)$ 倍され、単調に増大する。一方オイラー法 (3) をわずかに修正した写像

$$q_{n+1} = q_n + \tau p_n, \quad p_{n+1} = p_n - \tau q_{n+1} (= -\tau q_n + (1 - \tau^2)p_n) \quad (4)$$

は厳密にシンプレクティック写像

$$dp_{n+1} \wedge dq_{n+1} = \frac{\partial(p_{n+1}, q_{n+1})}{\partial(p_n, q_n)} dp_n \wedge dq_n = dp_n \wedge dq_n \quad (5)$$

となっている。この写像を繰り返し使うことによってエネルギー値は各ステップで厳密には保存されないものの、決して単調には増大しないことが確かめられる。図 1 を参照せよ。これは写像

Error of energy

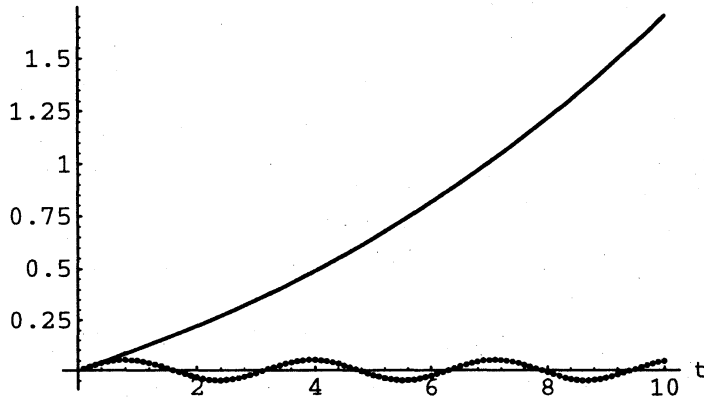


図 1: 調和振動子の場合のオイラー法（実線）と 1 次の陽的シンプレクティック法（点線）によるエネルギーの誤差。ステップサイズは共に $\tau = 0.1$

(4) が厳密な保存量

$$\tilde{H} := H + \tau H_1 := \frac{1}{2}(p^2 + q^2) + \frac{\tau}{2}pq = \text{const.} \quad (6)$$

を有することによる。

一般に n 次のシンプレクティック解法は実は

$$\tilde{H} = H + \tau^n H_n + o(\tau^{n+1}) \quad (7)$$

なるハミルトン系の厳密な時間発展を記述していることが知られ、その結果 $\tilde{H}$ が保存される。そしてエネルギーの誤差は永遠に τ^n のオーダーに留まる。

3 可変時間ステップ

ケプラー問題などで比較的離心率の大きな楕円軌道を数値的に求める際には一定のステップ（刻み幅）ではなく可変時間ステップを用い精度が落ちるのを防ぐのが常套手段である。衝突に近い軌道の場合は不可欠となる。そこでシンプレクティック積分法を可変時間ステップで用いるという考えが当然生じる。ところが結果は残念ながら思わしくなく、エネルギーの誤差が増大し始める。つまりシンプレクティック積分法の利点であった「エネルギーの誤差が増大しない」という特質が失われてしまうのである。図 2 はハミルトニアン

$$H = \frac{1}{2}(p_1^2 + p_2^2) - \frac{1}{r}, \quad r := \sqrt{q_1^2 + q_2^2} \quad (8)$$

で記述される平面ケプラー運動を 4 次のルンゲ・クッタ法 (RK4) と 4 次の陽的シンプレクティック法 (SI4) によって刻み幅一定で数値積分し各時刻におけるエネルギー値の誤差 $H(t) - H(0)$ をプロットしたものである。 $t = 0$ における初期値としては

$$(q_1, q_2, p_1, p_2) = \left(1 + e, 0, \sqrt{(1 - e)/(1 + e)}, 0\right), \quad e = 0.5 \quad (9)$$

周期 (T) はそれぞれ $a = 1$, $e = 0.5$, $T = 2\pi$ となる。また初期時刻 $t = 0$ は楕円軌道上の遠心点に相当する。一定の刻み幅 $\tau_{\text{const}} = 0.05$ で 1000 ステップ（約 8 周期）計算している。4 次

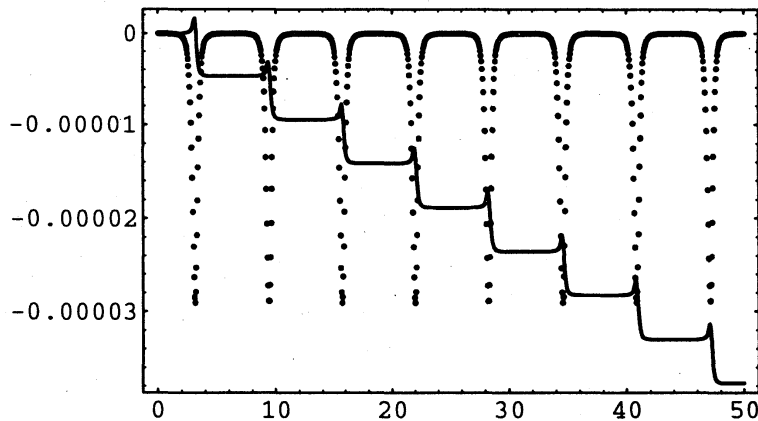


図 2: 離心率 $e = 0.5$ のケプラー楕円軌道の RK4 (実線) と SI4 (点線) によるエネルギーの誤差。横軸は時刻 t 。 $\tau = 0.05$ の一定ステップ

のルンゲ・クッタ法の場合、本来保存されるべきエネルギー値は階段関数的に減少している。速度が大きくなる軌道の近心点の近くでエネルギー値が大きく変化して誤差を生んでいることに注意しよう。一方 4 次の陽的シンプレクティック法の場合、近心点の近くでエネルギー値は大きく振れはするものの元の値に復帰し、全体として誤差のオーダーは増大していない。これはすでに述べた保存量 $\tilde{H} = \text{const.}$ が存在することによる。図 3 は両者の比較を可変ステップで行なった結果である。可変ステップの一つのとりかたとして各ステップにおいて刻み幅 τ_n を動径 $r_n = \sqrt{q_{1,n}^2 + q_{2,n}^2}$ に比例するように

$$\tau_n = r_n \cdot \tau \quad (10)$$

によって計算し積分を実行している。楕円軌道上速度が大きくなる近心点の近くでは平均より小さな刻み幅、速度が小さくなる遠心点の近くでは大きな刻みを自動的に採用することを (10) は意味している。動径 r の時間平均が 1 であるため 1000 ステップ後の時刻は固定ステップの場合と同じく $t = 50$ となる。4 次のルンゲ・クッタ法の場合、一定ステップと可変ステップを比較すると明らかに可変ステップの方が優れていると言える。エネルギーの誤差は可変ステップの時には一定ステップの時と比べて一桁以上小さくなっている。一方シンプレクティック積分法 (SI4) の場合、一定ステップの時には存在しなかったエネルギーの誤差の永年の増大が可変ステップによって出現し、誤差の絶対値自身も RK4 によるものよりも大きくなっている。

4 対称化された可変時間ステップ

上の例で用いた 4 次のシンプレクティック解法 (SI4) は時間反転対称性がある。また [3] で導出された 2 次、4 次、6 次、8 次の解法は全て時間反転対称性を持つ。この時間反転対称性はもとともスキームが非可換な微分作用素 A, B の指数関数の対称的な分解に基づくことによっている。2 次のスキームの場合

$$\exp[\tau(A + B)] = \exp\left(\frac{\tau}{2}A\right) \exp(\tau B) \exp\left(\frac{\tau}{2}A\right) + o(\tau^3) \quad (11)$$

から $S(\tau) = \exp(\frac{\tau}{2}A) \exp(\tau B) \exp(\frac{\tau}{2}A)$ と置けば、明らかに

$$S(\tau)S(-\tau) = \text{identity} \quad (12)$$

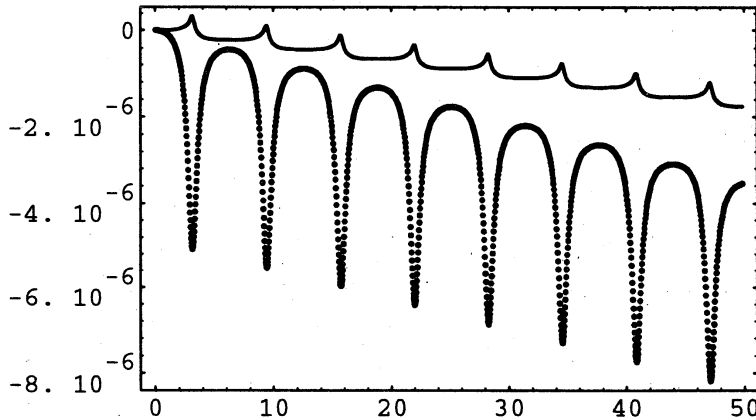


図 3: 離心率 $e = 0.5$ のケプラー楕円軌道の RK4 (実線) と SI4 (点線) によるエネルギーの誤差。横軸は時刻 t 。可変時間ステップ

さらには

$$S(\tau)^k S(-\tau)^k = \text{identity} \quad (13)$$

が導かれる。つまり丸め誤差を無視すれば、数値計算の初期値は完全に回復される。

しかしこの対称性も先の可変時間ステップの導入によって損なわれる。 $z_n \rightarrow z_{n+1}$ に用いられる時間ステップの値 τ_n が z_n だけによって決められるために

$$S(\tau_n) S(-\tau_{n+1}) \neq \text{identity} \quad (14)$$

となるからである。

P.Hut et al.[1] は可変時間ステップにおいて時間反転対称性を保持するために、陰的な時間ステップの決定法

$$z_{n+1} = f(z_n, \tau_{n,n+1}), \quad \tau_{n,n+1} = \frac{1}{2}(h(z_n) + h(z_{n+1})) \quad (15)$$

を提案した。ここで $z_n = (q_n, p_n)$ であり、 $h(z)$ は状態 z において時間ステップをきめる決定関数である。先の可変時間ステップ法は同じ表記をすれば

$$z_{n+1} = f(z_n, \tau_n), \quad \tau_n = h(z_n) \quad (16)$$

と書けることになる。(15)においては、ステップ $\tau_{n,n+1}$ を決めるために z_{n+1} の情報が必要となるので、 $\tau_{n,n+1}$ は反復法で求める必要がある。しかし一旦反復が収束して $\tau_{n,n+1}$ が求まれば、それは z_n と z_{n+1} を同等に含んでいるので、時間反転対称性

$$S(\tau_{n,n+1}) S(-\tau_{n,n+1}) = \text{identity} \quad (17)$$

が保証されることになる。

図 4 は 4 次のシンプレクティック法の場合に (15) の反復回数を 0, 1, 2, 3 としたときのエネルギーの誤差の増大の様子である。図 4 から反復の効果は明らかである。また同じ現象は 6 次、8 次のシンプレクティック解法を用いても観察される。

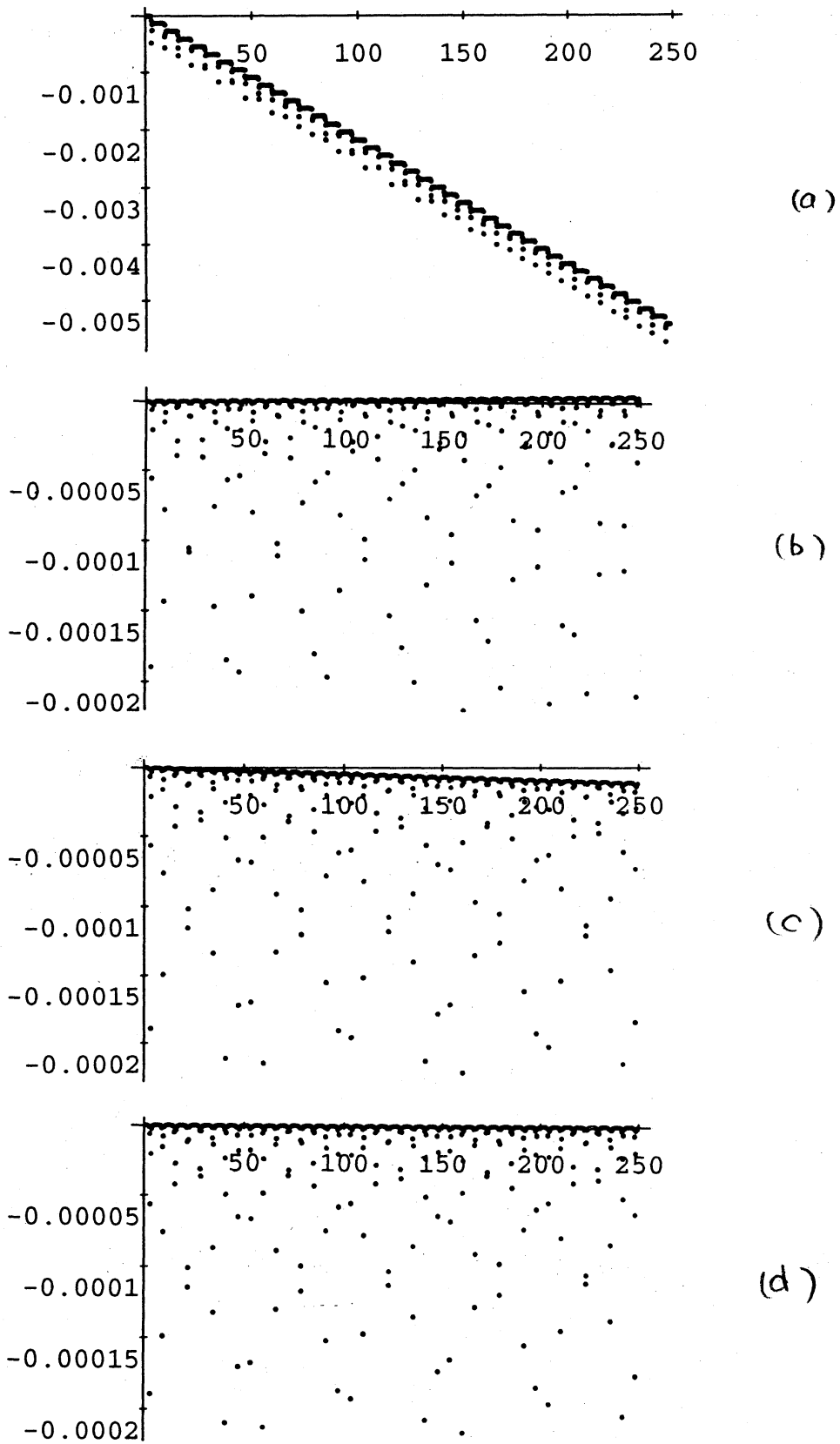


図 4: 離心率 $e = 0.5$ のケプラー楕円軌道の対称化された可変時間ステップでの SI4 によるエネルギーの誤差。横軸は時刻 t 。(a), (b), (c), (d) は反復回数 0, 1, 2, 3 に対応

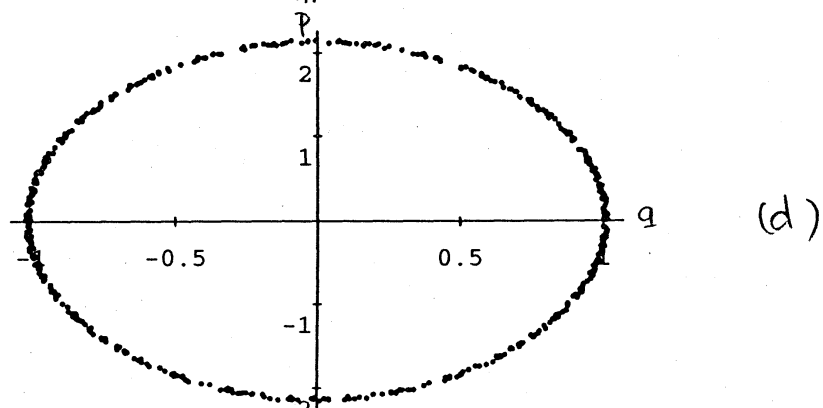
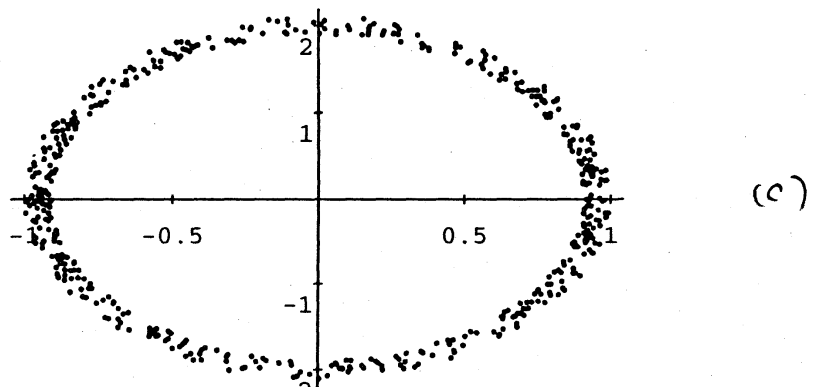
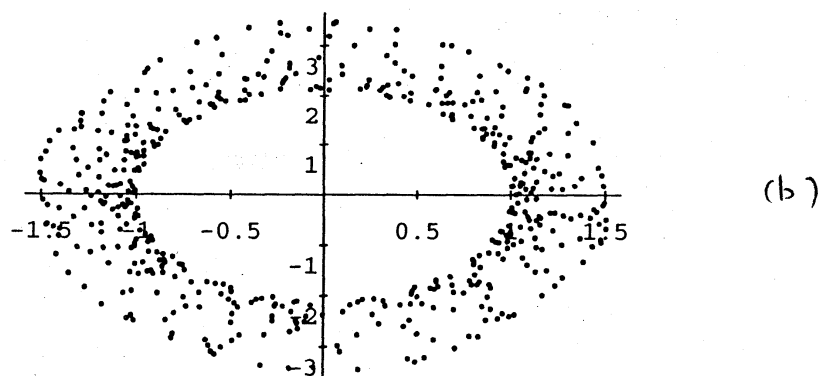
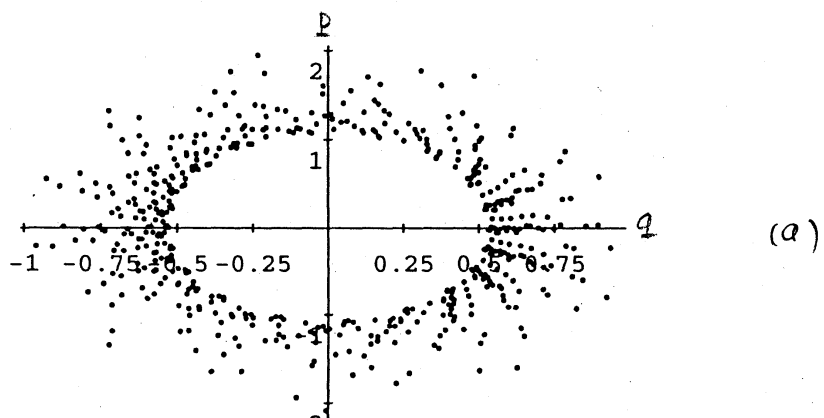


図 5: 調和振動子 (18) の可変時間ステップによる解。 (a), (b), (c), (d) はそれぞれ (15) の反復回数が 0, 1, 2, 3 に対応する。

5 1次元の調和振動子の例

時間ステップを(15)反復法で求めることの、より直接的な影響を見るために1次元の調和振動子

$$H = \frac{1}{2}p^2 + \frac{\omega^2}{2}q^2, \quad \omega = 2 \quad (18)$$

を敢えて可変時間ステップを用いて2次のシンプレクティック法で解くことにする。時間ステップの取り方としては

$$h(z) = \sqrt{q^2 + p^2} \quad (19)$$

を採用した。もちろんこの系は固定時間ステップで良い数値結果が得られる。図5は4の反復回数をそれぞれ1, 2, 3, 4としたときに得られる数値解である。図から明らかに反復の影響は、固定ステップの時に存在した保存量(7)の存在を示唆しているように見えるが、この点についての厳密な議論はまだ無い。

参考文献

- [1] Hut, P., Makino, J. and McMillan, S: 1994, 'Building a better leapfrog', *preprint*,
- [2] Sanz-Serna, J.M.: 1992, 'Symplectic integrators for Hamiltonian problems : an overview', *Acta Numerica* **1**, 243-286
- [3] Yoshida, H.: 1990, 'Construction of higher order symplectic integrators', *Phys. Lett. A* **150**, 262-268
- [4] Yoshida, H.: 1993, 'Recent progress in the theory and application of symplectic integrators', *Celest. Mech.* **56**, 27-43