

エネルギー保存則を満たす陽的差分法

富山県立大学工学部 石森 勇次 (Yuji Ishimori)

0 はじめに

常微分方程式を数値的に解くためのよい差分法として、どのようなものを考えたらよいであろうか？ 様々な視点で提案された差分法が存在するが、ここでは保存力学系に対して、次の2点を満たす差分法を提案する。

- (1) 厳密に満たされるエネルギー保存則を持つ ☞ 質（広義の精度）がよい
- (2) 計算方法が陽解法である ☞ 計算効率がよい

非線形系では、一般にこれら2つの条件を満たすことは困難である[1-4]。しかし、非線形系であっても、ある場合には(1)と(2)を満たす差分法を構成することができる。以下の議論では、エネルギー（ハミルトニアン）が

$$H = \frac{1}{2} \left(\frac{du}{dt} \right)^2 + V(u) = \frac{1}{2} p^2 + V(u) \quad (1)$$

で表される系を考える。各節において、ポテンシャルが次のような場合について差分法を提案する。

- 1: 高々4次の多項式（1変数の系）[5]
- 2: 高々4次の多項式（2変数以上の系）[5]
- 3: 5次以上の多項式（1変数の系）
- 4: 非多項式 [6]

1 高々4次の多項式（1変数の系）

微分方程式（運動方程式）として

$$\frac{d^2 u}{dt^2} = - \frac{\partial V(u)}{\partial u} \quad (2)$$

を考える。この式に対して、エネルギーの保存則

$$\frac{dH}{dt}=0, H=\frac{1}{2}\left(\frac{du}{dt}\right)^2+V(u) \quad (3)$$

が成り立つ。 Δt をきざみ幅として

$$u_n=u(t_n), t_n=n\Delta t \quad (n=0,1,2,\dots) \quad (4)$$

とおく。いま、ポテンシャルを

$$V(u)=\sum_{i=1}^k F_i(u)G_i(u) \quad (5)$$

のように分解したとすると、微分方程式(2)に対して、差分方程式

$$\begin{aligned} & \frac{u_{n+1}-2u_n+u_{n-1}}{\Delta t^2} \\ & = -\sum_{i=1}^k \left[\frac{F_i(u_{n+1})-F_i(u_{n-1})}{u_{n+1}-u_{n-1}} G_i(u_n) + F_i(u_n) \frac{G_i(u_{n+1})-G_i(u_{n-1})}{u_{n+1}-u_{n-1}} \right] \end{aligned} \quad (6)$$

を考えると、(3)式に対応する差分系におけるエネルギーの保存則

$$\begin{aligned} & \frac{H_{n+1}-H_n}{\Delta t}=0, H_n=K_n+V_n \\ & K_n=\frac{1}{2}\left(\frac{u_n-u_{n-1}}{\Delta t}\right)^2, V_n=\frac{1}{2}\sum_{i=1}^k [F_i(u_n)G_i(u_{n-1})+F_i(u_{n-1})G_i(u_n)] \end{aligned} \quad (7)$$

が成り立つ。(6)式より、もし $F_i(u), G_i(u)$ が高々2次の多項式、即ちポテンシャル $V(u)$ が高々4次の多項式であれば、差分方程式は u_{n+1} の1次式となるので陽解法である。

ポテンシャルとして、一般的な4次の多項式

$$V(u)=\frac{a}{2}u^2+\frac{b}{3}u^3+\frac{c}{4}u^4 \quad (8)$$

を考える。次のようにポテンシャルを分解する。

$$V(u)=\lambda\frac{a}{2}u \times u + (1-\lambda)\frac{a}{2}u^2 \times 1 + \frac{b}{3}u^2 \times u + \frac{c}{4}u^2 \times u^2 \quad (9)$$

ここで2次の項は2通りに分解でき、 $0 \leq \lambda \leq 1$ である。この分解に対して、差分方程式は

$$\frac{u_{n+1}-2u_n+u_{n-1}}{\Delta t^2} = -\frac{a}{2}[2\lambda u_n + (1-\lambda)(u_{n+1}+u_{n-1})] - \frac{b}{3}u_n(u_{n+1}+u_n+u_{n-1}) - \frac{c}{2}u_n^2(u_{n+1}+u_{n-1}) \quad (10)$$

となる。なお、この差分方程式は、変数変換

$$x_n = u_n, \quad y_n = u_{n-1} \quad (11)$$

$$A = \frac{c}{4}, \quad B = \frac{b}{6}, \quad C = \frac{1}{2\Delta t^2} + \frac{a}{4}(1-\lambda), \quad D = \frac{a\lambda}{2} - \frac{1}{\Delta t^2}$$

を通じて、McMillan の可積分写像[7,8]

$$x_{n+1} = -y_n - f(x_n), \quad y_{n+1} = x_n, \quad (12)$$

$$f(x) = \frac{Bx^2 + Dx}{Ax^2 + Bx + C}$$

$$Ax_n^2 y_n^2 + B(x_n^2 y_n + x_n y_n^2) + C(x_n^2 + y_n^2) + Dx_n y_n = \text{const.} (=H_n) \quad (13)$$

と一致する。また、(10)式は (u_n, p_n) から (u_{n+1}, p_{n+1}) への正準変換：

$$p_n = \frac{\partial W(u_n, p_{n+1})}{\partial u_n}, \quad u_{n+1} = \frac{\partial W(u_n, p_{n+1})}{\partial p_{n+1}} \quad (14)$$

$$W(u, p) = up + \Delta t \left[\frac{1}{2}p^2 + \frac{1}{\Delta t^2} \int^u (f(u) + 2u) du \right] \quad (15)$$

とみなせるので、シンプレクティック写像である[9]。即ち、面積保存写像である。

2 高々4次の多項式(2変数以上の系)

まず、変数が2個の系

$$\frac{d^2 u}{dt^2} = -\frac{\partial V(u, v)}{\partial u}, \quad \frac{d^2 v}{dt^2} = -\frac{\partial V(u, v)}{\partial v} \quad (16)$$

を考える。エネルギーは

$$H = \frac{1}{2} \left(\frac{du}{dt} \right)^2 + \frac{1}{2} \left(\frac{dv}{dt} \right)^2 + V(u, v) \quad (17)$$

で与えられる。1変数のときと同様に、ポテンシャルを

$$V(u, v) = \sum_{i=1}^k F_i(u, v) G_i(u, v) \quad (18)$$

のように分解したとすると、微分方程式(16)に対して、差分方程式

$$\begin{aligned} & \frac{u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}}{\Delta t^2} \\ &= -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^k \left[\frac{F_i(u_{n+1}, v_{n+1}) - F_i(u_{n-1}, v_{n+1})}{u_{n+1} - u_{n-1}} + \frac{F_i(u_{n+1}, v_{n-1}) - F_i(u_{n-1}, v_{n-1})}{u_{n+1} - u_{n-1}} \right] G_i(u_n, v_n) \\ & \quad - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^k F_i(u_n, v_n) \left[\frac{G_i(u_{n+1}, v_{n+1}) - G_i(u_{n-1}, v_{n+1})}{u_{n+1} - u_{n-1}} + \frac{G_i(u_{n+1}, v_{n-1}) - G_i(u_{n-1}, v_{n-1})}{u_{n+1} - u_{n-1}} \right] \\ & \quad \frac{v_{n+1} - 2v_n + v_{n-1}}{\Delta t^2} \\ &= -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^k \left[\frac{F_i(u_{n+1}, v_{n+1}) - F_i(u_{n+1}, v_{n-1})}{v_{n+1} - v_{n-1}} + \frac{F_i(u_{n-1}, v_{n+1}) - F_i(u_{n-1}, v_{n-1})}{v_{n+1} - v_{n-1}} \right] G_i(u_n, v_n) \\ & \quad - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^k F_i(u_n, v_n) \left[\frac{G_i(u_{n+1}, v_{n+1}) - G_i(u_{n+1}, v_{n-1})}{v_{n+1} - v_{n-1}} + \frac{G_i(u_{n-1}, v_{n+1}) - G_i(u_{n-1}, v_{n-1})}{v_{n+1} - v_{n-1}} \right] \end{aligned} \quad (19)$$

を考えると、差分系におけるエネルギー

$$H_n = K_n + V_n$$

$$K_n = \frac{1}{2} \left(\frac{u_n - u_{n-1}}{\Delta t} \right)^2 + \frac{1}{2} \left(\frac{v_n - v_{n-1}}{\Delta t} \right)^2 \quad (20)$$

$$V_n = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^k [F_i(u_n, v_n) G_i(u_{n-1}, v_{n-1}) + F_i(u_{n-1}, v_{n-1}) G_i(u_n, v_n)]$$

が保存する。もし、 $F_i(u, v), G_i(u, v)$ が高々 2 次の多項式、即ちポテンシャル $V(u, v)$ が高々 4 次の多項式であれば、差分法(19)は陽解法である。

残念ながら、差分方程式(19)は1変数のときと違い、一般的な4次の多項式ポテンシャルに対してシンプレクティック写像になるわけではない。例えば4次だけのポテンシャル

$$V(u,v)=\frac{a}{4}(u^4+v^4)+\frac{b}{2}u^2v^2 \quad (21)$$

に対して、パラメータが可積分な場合（ $a/b=1$, $a/b=1/3$ ）でないと差分方程式はシンプレクティックではない（ただし、位相空間の体積要素はパラメータが非可積分な場合でも保存する）。これは、差分系ではエネルギーが保存することとシンプレクティック構造をもつこと、これら両者とも厳密に成り立たせることは不可能であるということによる[10]。しかし、可積分系であっても差分方程式(19)がシンプレクティックではない場合もある。例えば Henon-Heiles ポテンシャルの3次の項を一般化したポテンシャル[11]

$$V(u,v)=auv^2-\frac{b}{3}u^3 \quad (22)$$

に対して、パラメータが可積分な場合（ $a/b=-1/6$, $a/b=-1/16$, ただし $a/b=-1$ は除く）であっても差分方程式(19)はシンプレクティックではない。

変数の数が3個以上の系

$$\frac{d^2u}{dt^2}=-\frac{\partial V(u,v,w,\dots)}{\partial u}, \frac{d^2v}{dt^2}=-\frac{\partial V(u,v,w,\dots)}{\partial v}, \frac{d^2w}{dt^2}=-\frac{\partial V(u,v,w,\dots)}{\partial w}, \dots \quad (23)$$

に対しては高々4次のポテンシャルを

$$V(u,v,w,\dots)=F_1(u,v)G_1(u,v)+F_2(u,v)G_2(u,w)+F_3(u,v)G_3(v,w)+\dots \quad (24)$$

のような高々2次の多項式の積の和に分解すれば、2変数のときと同様にしてエネルギー保存則を満たす陽的差分法を構成することができる。

3 5次以上の多項式（1変数の系）

ポテンシャルが5次以上の場合、3階以上の差分方程式、即ち多段法を考えるならば、エネルギー保存則を満たし、かつ陽解法となる差分法を構成することができる。このとき、差分系におけるエネルギー H_n を2節で述べたような2点 t_n, t_{n-1} での関数値 u_n, u_{n-1} で表すのではなく、一般に r 点 $t_n, t_{n-1}, \dots, t_{n-r+1}$ での関数値 $u_n, u_{n-1}, \dots, u_{n-r+1}$ で表すことが必要である。ここで次の性質に注目する（証明略）。

♥ $u_n, u_{n-1}, \dots, u_{n-r+1}$ の対称式を P_n とすると、 $P_{n+1}-P_n$ は $u_{n+1}-u_{n-r+1}$ で割り切れる。

従って、エネルギー H_n が $u_n, u_{n-1}, \dots, u_{n-r+1}$ の対称式で、 u_n について高々 2 次であれば、差分方程式として

$$\frac{H_{n+1}-H_n}{u_{n+1}-u_{n-r+1}}=0 \quad (25)$$

を考えると、(25)は u_{n+1} の高々 1 次式となり、また

$$\frac{H_{n+1}-H_n}{\Delta t}=r \frac{H_{n+1}-H_n}{u_{n+1}-u_{n-r+1}} \frac{u_{n+1}-u_{n-r+1}}{r \Delta t}=0 \quad (26)$$

となるので、エネルギーの保存則を満たしかつ陽的な差分法となる。

$r=3$ の場合について、具体的に $H_n=K_n+V_n$ をどのような式にすればよいのか考える。まず、運動エネルギー K_n は次のようにすればよい。

$$K_n=\frac{1}{12}\left[\left(\frac{u_n-u_{n-1}}{\Delta t}\right)^2+4\left(\frac{u_n-u_{n-2}}{2\Delta t}\right)^2+\left(\frac{u_{n-1}-u_{n-2}}{\Delta t}\right)^2\right] \quad (27)$$

この式は u_n, u_{n-1}, u_{n-2} について対称であり、 u_n の 2 次式である。一方、 V_n はポテンシャルを

$$V(u)=\sum_{i=1}^k E_i(u)F_i(u)G_i(u) \quad (28)$$

のように分解し、差分系でのポテンシャルを、 u_n, u_{n-1}, u_{n-2} について対称な式[12]

$$V_n=\frac{1}{6}\sum_{i=1}^k \begin{vmatrix} E_i(u_n) & F_i(u_n) & G_i(u_n) \\ E_i(u_{n-1}) & F_i(u_{n-1}) & G_i(u_{n-1}) \\ E_i(u_{n-2}) & F_i(u_{n-2}) & G_i(u_{n-2}) \end{vmatrix}_+ \quad (29)$$

とすればよい。ここで $|\cdot|_+$ は行列式の展開式において置換の符号をすべて +1 にした式を意味する。もし、 $E_i(u), F_i(u), G_i(u)$ が u の高々 2 次の多項式（ポテンシャルは高々 6 次の多項式）であれば、 V_n は u_n の高々 2 次の多項式となる。従って、これらのエネルギーの和 $H_n=K_n+V_n$ に対して、差分方程式(25)はエネルギー保存則を満たす陽的差分法となる。一般に、高々 $2r$ 次の多項式ポテンシャルに対して、 r 階の差分方程式を考えればエネルギー保存則を満たす陽的差分法を構成することができる。

ところで、多段法には欠点がある。即ち、力学系として差分方程式を見たとき、多自由度の

系と見なされることである。差分方程式(6)では、2次元位相空間での軌道が等エネルギー曲線上にあるので、カオス軌道になったり、不安定現象を起こしたりしないが、多段法ではそのような現象が起こらないという保証はない。6次のポテンシャル

$$V(u) = \frac{1}{6}u^6 = \frac{1}{6}u^2 \times u^2 \times u^2 \quad (30)$$

について、このことを数値的に見てみる。差分方程式は

$$\frac{u_{n+1} - u_n - u_{n-1} + u_{n-2}}{2\Delta t^2} = -\frac{1}{2}u_n^2 u_{n-1}^2 (u_{n+1} + u_{n-2}) \quad (31)$$

で与えられる。スケール変換 $\Delta t^{1/2}u \rightarrow u$ によって方程式から Δt を消去できるので、きざみ幅を大きくすることと、振動の振幅（非線形性）を大きくすることは同じことである。この3階の差分方程式を次のような1階の連立差分方程式に書く。

$$\begin{aligned} \frac{u_{n+1} + u_n}{2} &= v_{n+1} \\ \frac{v_{n+1} - v_n}{\Delta t} &= p_{n+1} \end{aligned} \quad (32)$$

$$\frac{p_{n+1} - p_n}{\Delta t} = -\frac{1}{2}u_n^2 (2v_n - u_n)^2 (v_{n+1} - \Delta t p_n)$$

図1に (u, v, p) 空間での解軌道のようなすを示した。どれも初期値を $u_0=1.5, v_0=1.5, p_0=0.0$ とした。 Δt が小さいうちは、軌道はほとんど1本の閉曲線上にあり、この閉曲線はほとんど $u=v$ 平面上にある。従って、多段法の欠点は現われていない。しかし、 Δt を大きくしていくと、次第に軌道は複雑になっていく。まず、2本の閉曲線上に軌道が分れる。ステップ数が奇数のときと偶数のときで異なる閉曲線上に軌道がのる。この現象が起こるのは、例えば2次のポテンシャル

$$V(u) = \frac{1}{2}u^2 = \frac{1}{2}u \times u \quad (33)$$

に対する差分方程式が

$$\left[\frac{u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}}{\Delta t^2} + u_n \right] + \left[\frac{u_n - 2u_{n-1} + u_{n-2}}{\Delta t^2} + u_{n-1} \right] = 0 \quad (34)$$

のようになることからわかるように、もともとこの差分法が分離しやすい性質を持つためであ

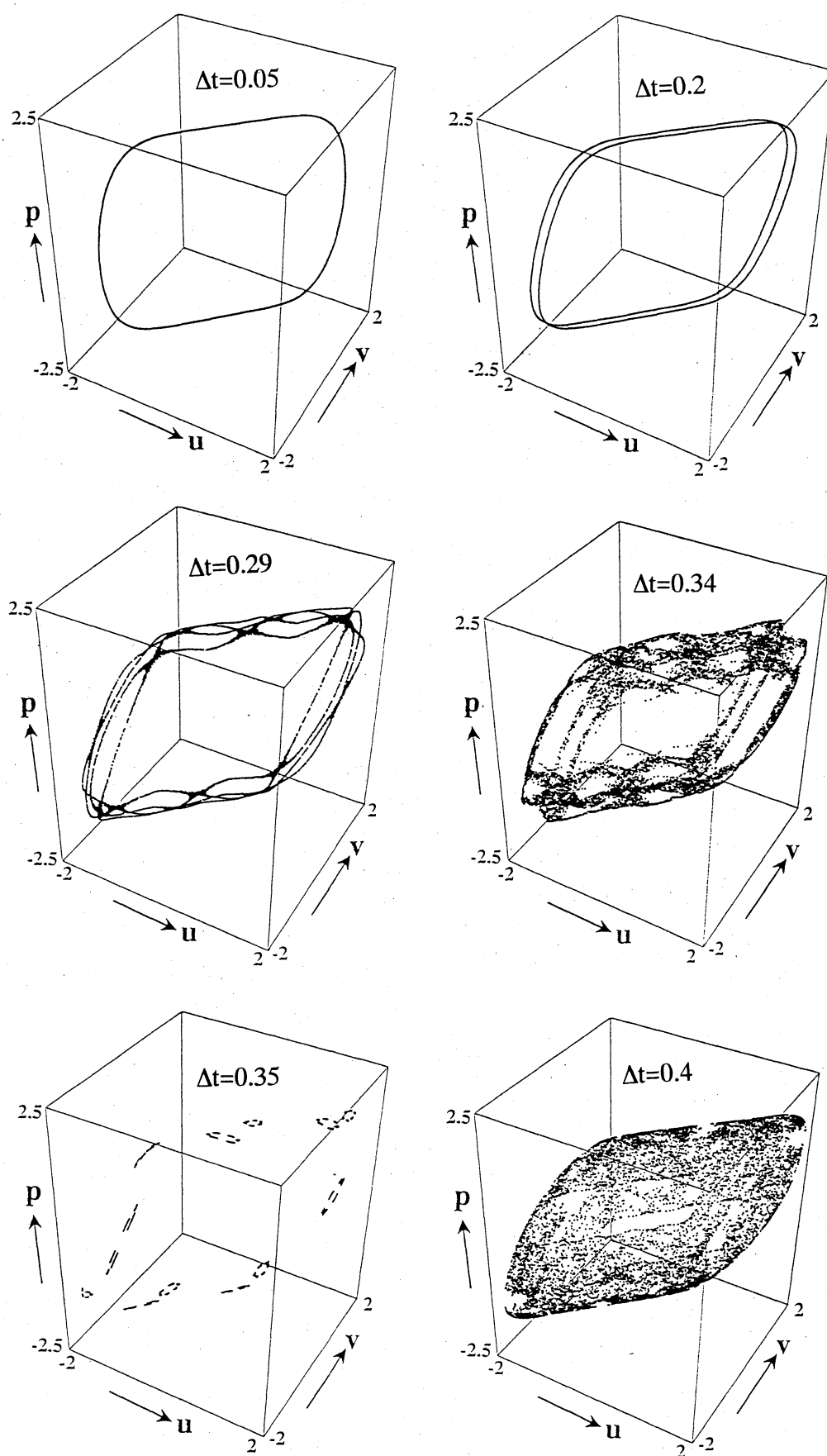


图 1

る。さらに Δt を大きくすると非常に複雑な軌道になってしまう。しかし、エネルギー不変曲面が存在するために、いつも軌道が有限の範囲に束縛されている。従って、無限遠へ飛び去ってしまうことはない。

4 非多項式

指数関数のような、多項式ではないポテンシャルに対しては、エネルギーが高々2次の多項式で表されるような変数を選べばよい。ただし、条件

$$\frac{\partial V(u)}{\partial u} = F(V(u)) \quad (35)$$

または

$$V(u) = U(u)^2, \quad \frac{\partial U(u)}{\partial u} = G(U(u)) \quad (36)$$

を満たすものとする。ここで、 $F(V)$, $G(U)$ はそれぞれ V , U の一価関数である。例えば、

$$V(u) = u \Rightarrow F(V) = 1$$

$$V(u) = e^u \Rightarrow F(V) = V$$

$$V(u) = u^{-1} \Rightarrow F(V) = -u^2 \quad (37)$$

$$V(u) = \tanh u \Rightarrow F(V) = 1 - V^2$$

$$V(u) = \sinh u \Rightarrow F(V) = \sqrt{1 + V^2}$$

などがある。この場合、微分方程式（運動方程式）として(2)式ではなく連立微分方程式

$$\frac{du}{dt} = p, \quad \frac{dp}{dt} = -\frac{\partial V(u)}{\partial u} \quad (38)$$

をまず考える。

条件(35)の場合、変数変換

$$a = V(u) \quad (39)$$

によって、微分方程式(38)は

$$\frac{da}{dt} = F(a)p, \quad \frac{dp}{dt} = -F(a) \quad (40)$$

となる。差分方程式として陽的スキーム

$$\frac{a_{n+1} - a_n}{\Delta t} = F(a_n) \frac{p_{n+1} + p_n}{2}, \quad \frac{p_{n+1} - p_n}{\Delta t} = -F(a_n) \quad (41)$$

を考えると、エネルギー保存則

$$\frac{H_{n+1} - H_n}{\Delta t} = 0, \quad H_n = \frac{1}{2} p_n^2 + a_n \quad (42)$$

が成り立つ。

条件(36)の場合、変数変換

$$b = U(u) \quad (43)$$

によって、微分方程式(38)は

$$\frac{db}{dt} = G(b)p, \quad \frac{dp}{dt} = -2bG(b) \quad (44)$$

となる。差分方程式として陽的スキーム

$$\frac{b_{n+1} - b_n}{\Delta t} = G(b_n) \frac{p_{n+1} + p_n}{2}, \quad \frac{p_{n+1} - p_n}{\Delta t} = -(b_{n+1} + b_n)G(b_n) \quad (45)$$

を考えると、エネルギー保存則

$$\frac{H_{n+1} - H_n}{\Delta t} = 0, \quad H_n = \frac{1}{2} p_n^2 + b_n^2 \quad (46)$$

が成り立つ。

これらの保存則は、2節で提案した差分法の保存則と異なり、差分系の解軌道がもとの連続時間系の等エネルギー曲線上にのることを保証している。例えば、Morse ポテンシャル

$$V(u) = e^{-2u} - 2e^{-u} + \text{const.} = (e^{-u} - 1)^2 + \text{const.} \quad (47)$$

に対して、図2に差分方程式(45)の解軌道をプロットしたが、軌道は実線で示した厳密な等エネルギー曲線上にのっていることがわかる。

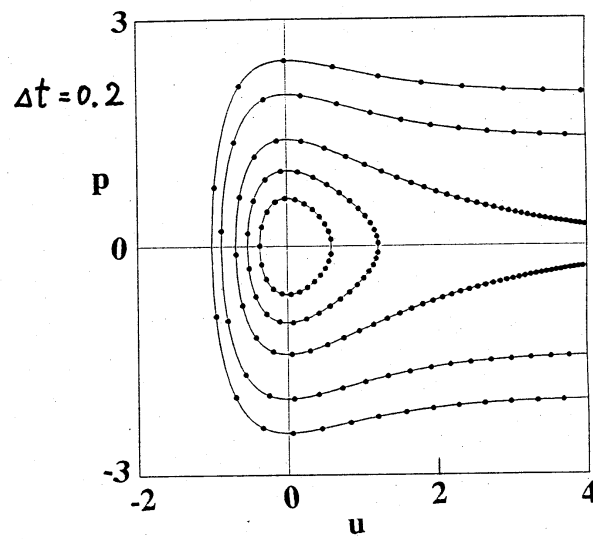


図2

この差分法を1次元格子系

$$H = \sum_m \left[\frac{1}{2M_m} p_m^2 + V(u_{m+1} - u_m) \right] \quad (48)$$

$$\frac{du_m}{dt} = \frac{p_m}{M_m}, \quad \frac{dp_m}{dt} = -\frac{\partial}{\partial u_m} [V(u_{m+1} - u_m) - V(u_m - u_{m-1})]$$

へ拡張することは簡単である。 $V(u)$ が条件(35)を満たす場合、変数変換

$$a_m = V(u_{m+1} - u_m) \quad (49)$$

によって微分方程式は

$$\frac{da_m}{dt} = F(a_m) \left(\frac{p_{m+1}}{M_{m+1}} - \frac{p_m}{M_m} \right), \quad \frac{dp_m}{dt} = F(a_m) - F(a_{m-1}) \quad (50)$$

となる。また、格子系に対するエネルギー保存則は

$$\frac{dH_m}{dt} = F(a_m) \frac{p_{m+1}}{M_{m+1}} - F(a_{m-1}) \frac{p_m}{M_m}, \quad H_m = \frac{1}{2M_m} p_m^2 + a_m \quad (51)$$

と表される。

$$a_m^n = a_m(t_n), p_m^n = p_m(t_n) \quad (52)$$

とおき、差分方程式として陽的スキーム

$$\frac{a_m^{n+1} - a_m^n}{\Delta t} = F(a_m^n) \left(\frac{p_{m+1}^{n+1} + p_{m+1}^n}{2M_{m+1}} - \frac{p_m^{n+1} + p_m^n}{2M_m} \right) \quad (53)$$

$$\frac{p_m^{n+1} - p_m^n}{\Delta t} = F(a_m^n) - F(a_{m-1}^n)$$

を考えると、エネルギー保存則

$$\frac{H_m^{n+1} - H_m^n}{\Delta t} = F(a_m^n) \frac{p_{m+1}^{n+1} + p_{m+1}^n}{2M_{m+1}} - F(a_{m-1}^n) \frac{p_m^{n+1} + p_m^n}{2M_m} \quad (54)$$

$$H_m^n = \frac{1}{2M_m} (p_m^n)^2 + a_m^n$$

が成り立つ。条件(36)を満たすポテンシャルに対しても、エネルギー保存則を満たす差分法を与えることはできるが、粒子数の数の2倍の未知数に対する連立1次方程式を解かないといけない。一般に、粒子数は非常に多いので、差分法は陰的スキームとなる。

参考文献

- [1] W.Strauss & L.Vazquez, J.Comput.Phys. **28** (1978) 271.
- [2] D.Greenspan, J.Comput.Phys. **56** (1984) 28.
- [3] T.Itoh & K.Abe, J.Comput.Phys. **77** (1988) 85.
- [4] R.Hirota, Difference analogues of nonlinear evolution equations in Hamiltonian form, preprint.
- [5] Y.Ishimori, Explicit energy conservative difference schemes for nonlinear dynamical systems with at most quartic potentials, preprint.
- [6] Y.Ishimori, Explicit Energy-Conserving Difference Methods for Hamiltonian Dynamics with Certain Types of Potential, preprint.
- [7] E.M.McMillan, *Topics in modern physics. A tribute to E.U.Condon* (Colorado Assoc. Univ. Press, Boulder, 1971) p.219.
- [8] G.R.W.Quispel, J.A.G.Roberts & C.J.Thompson, Phys.Lett.A **126** (1988) 419 ; Physica D **34** (1989) 183.
- [9] H.Yoshida, Celest.Mech. **56** (1993) 27.
- [10] Z.Ge & J.E.Marsden, Phys.Lett.A **133** (1988) 134.
- [11] A.P.Fordy, Physica D **52** (1991) 204.
- [12] 広田良吾、応用数理 VOL. 3 NO. 1 MAR. 1993年.