

並列型合成による高次の数値積分法 とエネルギー保存・面積保存について

石森 勇次
(工学部教養教育)

2次のエネルギー保存スキームの並列合成および2次の面積保存スキームの並列合成による高次の数値積分法について議論した。調和振動子では、どちらの高次スキームとも同じでエネルギーも面積も厳密に保存した。非調和振動子では、両者のスキームに違いが見られた。

キーワード：微分方程式，数値積分法，高次の精度，並列型合成，エネルギー保存，面積保存

1. はじめに

微分方程式に対する数値積分法として，近年位相空間の面積・体積保存やエネルギー保存などの系の特徴的な構造を保つような方法の研究が行われ，幾何学的数値積分法あるいは構造を保存するアルゴリズムとよばれている [1-3]。この幾何学的数値積分法の研究テーマに高次のスキームをどのように構成するのかという問題がある。その1つの方法として，低次のスキームを直列に連結する方法（直列型合成法：図1）があり，多くの研究者によって様々なスキームが提案されている [1,2]。一方，最近筆者により対称な2次のスキームを並列に連結する方法（並列型合成法：図2）も提案された [4]。

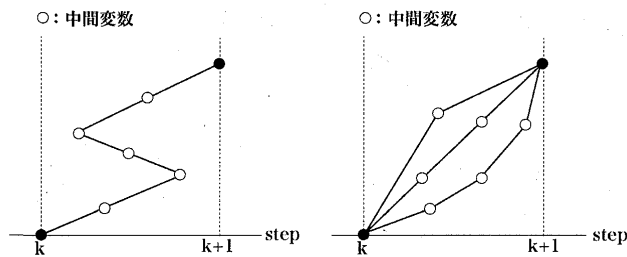


図1 直列型合成法

図2 並列型合成法

この並列型合成法では，2次のスキームとしてエネルギー保存スキームを用いれば高次のスキームにおいてエネルギー保存は保障されている [4]。しかし，2次のスキームとして面積保存スキームを用いれば高次のスキームにおいて面積保存が保障されているわけではない。そこで本論文では，エネルギー保存や面積保存について並列型合成法がどのような特徴を持つのかについて議論

する。

2. 並列型合成法

簡単のため，2次元のハミルトン力学系

$$\frac{dp}{dt} = -V'(q) \tag{1}$$

$$\frac{dq}{dt} = T'(p) \tag{2}$$

を考える。ここで， $H(p, q) = T(p) + V(q)$ はエネルギー関数（ハミルトニアン）である。この微分方程式の積分表示は

$$p(t^{k+1}) = p(t^k) - \int_{t^k}^{t^{k+1}} V'(q(t))dt \tag{3}$$

$$q(t^{k+1}) = q(t^k) + \int_{t^k}^{t^{k+1}} T'(p(t))dt \tag{4}$$

で与えられる。ここで， $t^k = k\Delta t$ ($k = 0, 1, 2, \dots$) であり， Δt は時間のきざみ幅である。

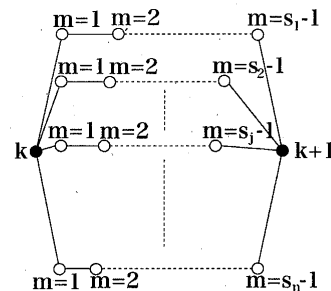


図3 中間変数 $P_j^{k+\frac{m}{s_j}}$, $Q_j^{k+\frac{m}{s_j}}$

並列型合成法では、積分

$$\int_{t^{k+b}}^{t^{k+a}} T'(P(t))dt, \int_{t^{k+b}}^{t^{k+a}} V'(Q(t))dt$$

の対称な 2 次の近似をそれぞれ

$$I_P^{a,b}, I_Q^{a,b}$$

として (3), (4) の数値積分を

$$p^{k+1} = p^k - \sum_{j=1}^n c_j \sum_{m=1}^{s_j} I_{Q_j}^{\frac{m}{s_j}, \frac{m-1}{s_j}} \quad (5)$$

$$q^{k+1} = q^k + \sum_{j=1}^n c_j \sum_{m=1}^{s_j} I_{P_j}^{\frac{m}{s_j}, \frac{m-1}{s_j}} \quad (6)$$

で与える。\$P_j, Q_j\$ は中間変数を表し (図 3)

$$P_j^{k+\frac{m}{s_j}} = \frac{s_j - m}{s_j} (p^k - \sum_{l=1}^m I_{Q_j}^{\frac{l}{s_j}, \frac{l-1}{s_j}}) + \frac{m}{s_j} (p^{k+1} + \sum_{l=m+1}^{s_j} I_{Q_j}^{\frac{l}{s_j}, \frac{l-1}{s_j}}) \quad (7)$$

$$Q_j^{k+\frac{m}{s_j}} = \frac{s_j - m}{s_j} (q^k + \sum_{l=1}^m I_{P_j}^{\frac{l}{s_j}, \frac{l-1}{s_j}}) + \frac{m}{s_j} (q^{k+1} - \sum_{l=m+1}^{s_j} I_{P_j}^{\frac{l}{s_j}, \frac{l-1}{s_j}}) \quad (8)$$

$$P_j^k = p^k, P_j^{k+1} = p^{k+1} \quad (9)$$

$$Q_j^k = q^k, Q_j^{k+1} = q^{k+1} \quad (10)$$

$$j = 1, 2, \dots, n; m = 1, 2, \dots, s_j - 1 \quad (11)$$

で与えられる。段数 \$s_1, s_2, \dots, s_n\$ を

$$s_1 < s_2 < \dots < s_n \quad (12)$$

を満たす任意の正の整数として、重み \$c_1, c_2, \dots, c_n\$ を

$$c_j = \frac{s_j^{2n-2}}{(s_j^2 - s_1^2) \dots (s_j^2 - s_{j-1}^2)(s_j^2 - s_{j+1}^2) \dots (s_j^2 - s_n^2)} \quad (13)$$

$$j = 1, 2, \dots, n (n \geq 2) \quad (14)$$

のように選ぶと、数値積分の誤差は \$O(\Delta t^{2n+1})\$ となり、\$2n\$ 次のスキームとなる。

積分の 2 次近似 \$I_P^{a,b}, I_Q^{a,b}\$ を差分商近似

$$I_P^{a,b} = (a-b)\Delta t \frac{T(P^{k+a}) - T(P^{k+b})}{P^{k+a} - P^{k+b}} \quad (15)$$

$$I_Q^{a,b} = (a-b)\Delta t \frac{V(Q^{k+a}) - V(Q^{k+b})}{Q^{k+a} - Q^{k+b}} \quad (16)$$

にとると、2 次のスキームおよび \$2n (n \geq 2)\$ 次のスキームではエネルギーが厳密に保存し、

$$\frac{dH}{dt} = 0 \quad (17)$$

の離散版

$$H^{k+1} - H^k = 0 \quad (18)$$

が成り立つ。ここで、

$$H^k = T(p^k) + V(q^k) \quad (19)$$

である。またこのとき、どの次数でも一般に位相空間の面積は保存しない。

積分の 2 次近似 \$I_P^{a,b}, I_Q^{a,b}\$ を中点近似

$$I_P^{a,b} = (a-b)\Delta t T' \left(\frac{P^{k+a} + P^{k+b}}{2} \right) \quad (20)$$

$$I_Q^{a,b} = (a-b)\Delta t V' \left(\frac{Q^{k+a} + Q^{k+b}}{2} \right) \quad (21)$$

にとると、2 次のスキームでは位相空間の面積が厳密に保存し、ヤコビアン

$$\frac{\partial(p(t), q(t))}{\partial(p(0), q(0))} = 1 \quad (22)$$

の離散版

$$\frac{\partial(p^{k+1}, q^{k+1})}{\partial(p^k, q^k)} = 1 \quad (23)$$

が成り立つ (付録 A.1)。しかし \$2n (n \geq 2)\$ 次のスキームでは一般に成り立たない。またこのとき、どの次数でも一般にエネルギーは保存しない。

3. 調和振動子の場合

この節では、調和振動子

$$H = \frac{1}{2}p^2 + \frac{1}{2}q^2 \quad (24)$$

$$\frac{dp}{dt} = -q, \frac{dq}{dt} = p \quad (25)$$

を考える。厳密解は

$$\begin{pmatrix} p(t) \\ q(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos t & -\sin t \\ \sin t & \cos t \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p(0) \\ q(0) \end{pmatrix} \quad (26)$$

で与えられる。

\$T(p), V(q)\$ が 2 次式するとき

$$\frac{T(x) - T(y)}{x - y} = T' \left(\frac{x + y}{2} \right) \quad (27)$$

$$\frac{V(x) - V(y)}{x - y} = V' \left(\frac{x + y}{2} \right) \quad (28)$$

となるので、2次のエネルギー保存スキームの並列合成と2次の面積保存スキームの並列合成は同じである。どちらも数値積分法は

$$\begin{pmatrix} p^{k+1} \\ q^{k+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C(\Delta t) & -S(\Delta t) \\ S(\Delta t) & C(\Delta t) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p^k \\ q^k \end{pmatrix} \quad (29)$$

の形にまとめられる。2次から6次までの具体的な $C(\Delta t)$, $S(\Delta t)$ の形は、2次するとき

$$C(\Delta t) = \frac{1 - \frac{1}{4}\Delta t^2}{1 + \frac{1}{4}\Delta t^2} \quad (30)$$

$$S(\Delta t) = \frac{\Delta t}{1 + \frac{1}{4}\Delta t^2} \quad (31)$$

4次するとき

$$C(\Delta t) = \frac{1 - \frac{5}{12}\Delta t^2 + \frac{1}{144}\Delta t^4}{1 + \frac{1}{12}\Delta t^2 + \frac{1}{144}\Delta t^4} \quad (32)$$

$$S(\Delta t) = \frac{\Delta t - \frac{1}{12}\Delta t^3}{1 + \frac{1}{12}\Delta t^2 + \frac{1}{144}\Delta t^4} \quad (33)$$

6次するとき

$$C(\Delta t) = \frac{C_1}{D} \quad (34)$$

$$S(\Delta t) = \frac{S_1}{D} \quad (35)$$

$$C_1 = 1 - \frac{47}{108}\Delta t^2 + \frac{349}{29160}\Delta t^4 + \frac{13}{139968}\Delta t^6 \quad (36)$$

$$+ \frac{1}{2624400}\Delta t^8 \quad (37)$$

$$S_1 = \Delta t - \frac{11}{108}\Delta t^3 + \frac{7}{29160}\Delta t^5 + \frac{1}{174960}\Delta t^7 \quad (38)$$

$$D = 1 + \frac{7}{108}\Delta t^2 + \frac{79}{29160}\Delta t^4 + \frac{19}{139968}\Delta t^6 \quad (39)$$

$$+ \frac{1}{2624400}\Delta t^8 \quad (40)$$

である。 $C(\Delta t)$, $S(\Delta t)$ は $\cos \Delta t$, $\sin \Delta t$ の有理関数近似になっており

$$C(\Delta t)^2 + S(\Delta t)^2 = 1$$

なので、エネルギー保存則

$$H^{k+1} - H^k = 0 \quad (41)$$

および面積保存則

$$\frac{\partial(p^{k+1}, q^{k+1})}{\partial(p^k, q^k)} = \begin{vmatrix} C(\Delta t) & -S(\Delta t) \\ S(\Delta t) & C(\Delta t) \end{vmatrix} = 1 \quad (42)$$

が厳密に成り立つ。

4. 非調和振動子の場合

この節では、非調和振動子

$$H = \frac{1}{2}p^2 + \frac{1}{4}(q^2 - 1)^2 \quad (43)$$

$$\frac{dp}{dt} = q - q^3, \quad \frac{dq}{dt} = p \quad (44)$$

を考える。ポテンシャルエネルギー $V(q)$ は図4のような関数であり、位相空間の軌道は図5のように3種類に分類される。

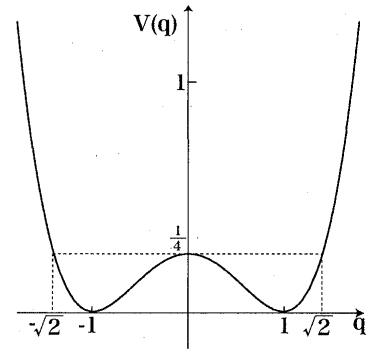


図4 ポテンシャル $V(q)$

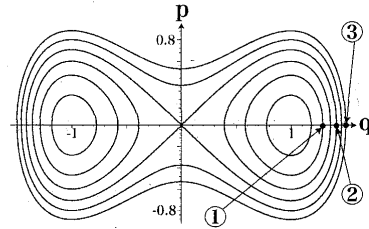


図5 位相空間のポートレート

きざみ幅 $\Delta t = 0.3$ とし段数 $s_j = j$ として、図5の3通りの初期値 ①, ②, ③ について、数値計算を行った。以下2次のエネルギー保存スキームを並列合成した $2n$ 次のスキームを2次を含め EP_{2n} と表し、2次の面積保存スキームを並列合成した $2n$ 次のスキームを2次を含め AP_{2n} と表す。

4.1 ① : $p^0 = 0, q^0 = 1.2$ の場合

2次の場合の解軌道を図6と図7に示した。EP₂ と AP₂ でほとんど違いはない。

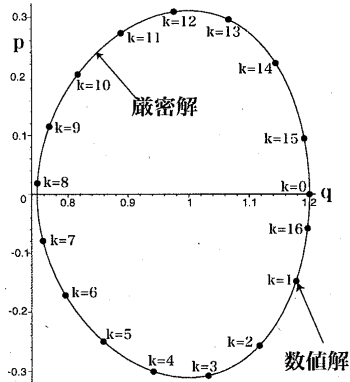


図6 解軌道 : EP₂

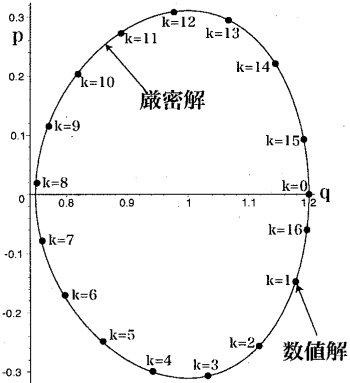


図7 解軌道 : AP₂

図8と図9には、2次の場合のエネルギーの変化を示した。EP₂ ではエネルギーの変化はないが、AP₂ では減少してからもとの値にもどっている。

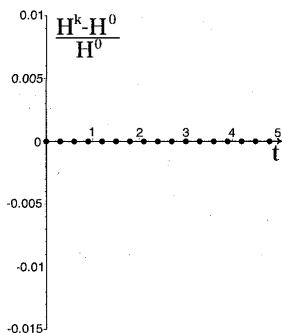


図8 エネルギーの変化 : EP₂

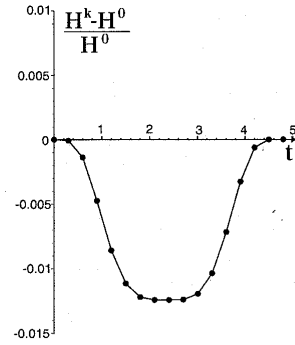


図9 エネルギーの変化 : AP₂

図10と図11には、6次の場合のエネルギーの変化を示した。状況は2次の場合とほとんど同じであるが、AP₆ の場合の変化は小さくなっている。

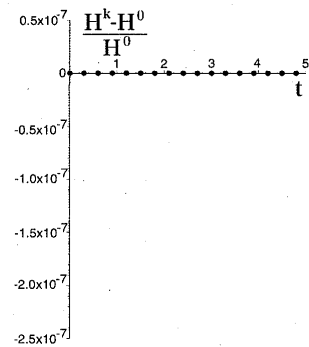


図10 エネルギーの変化 : EP₆

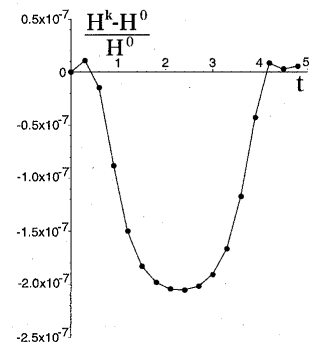


図11 エネルギーの変化 : AP₆

表1に $2n$ ($n = 1, 2, 3, 4, 5, 6$) 次の H^1 の値を示した。下線部は誤差を表している。EP_{2n} では誤差はなく、AP_{2n} では高次になるにつれ誤差が小さくなっている。

表1 エネルギーの値と次数

$2n$	$H^1 : EP_{2n}$	$H^1 : AP_{2n}$
2	0.0484000000000000	0.0483967799710763
4	0.0484000000000000	0.0483991246478105
6	0.0484000000000000	0.0484000005196297
8	0.0484000000000000	0.048399999933553
10	0.0484000000000000	0.0484000000000004
12	0.0484000000000000	0.0484000000000000

図12と図13には、2次の場合のヤコビアンの変化を示した。EP₂では1周期の前半で1より大きく後半で1より小さい値をとっており、一方的に増大または減少することはない。AP₂では1の値を保っている。

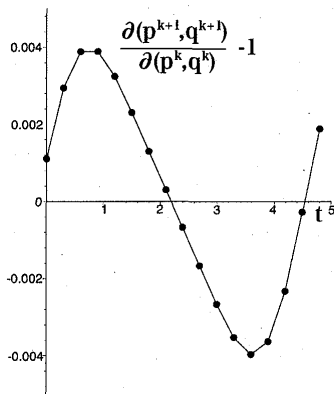


図12 ヤコビアンの変化：EP₂

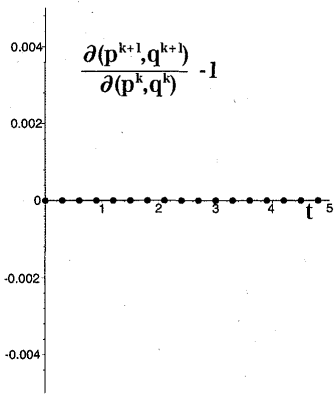


図13 ヤコビアンの変化：AP₂

図14と図15には、2次の場合について、 $k=0$ のとき (q^0, p^0) を中心とする半径 0.01 の円周上に均等に並べた 100 個の点が、 $k=16$ のとき (q^{16}, p^{16}) のまわりのどこに到達したのかを示した。どちらも円の形から楕円状の形に変形している。

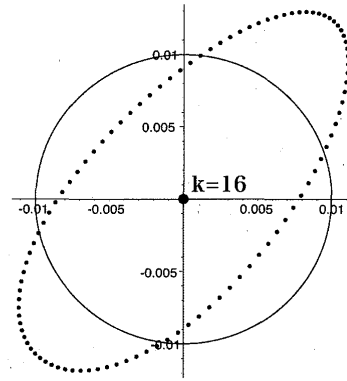


図14 領域の変化：EP₂

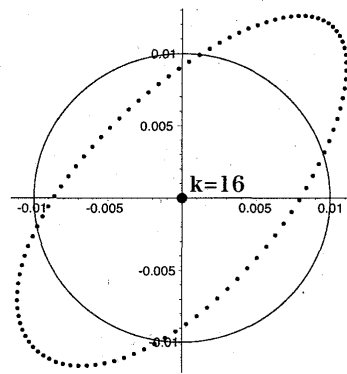


図15 領域の変化：AP₂

図16と図17には、2次の場合について、100 個の点で囲まれた領域の面積 S^k の変化を示した。面積は正確には計算できないが、大体の傾向は読み取れる。EP₂では、ヤコビアンが1より大きいときには面積が増大し、ヤコビアンが1より小さいときには面積が減少し1周期でほぼ初期値にもどっている。AP₂では、面積 S^k の変化はない。

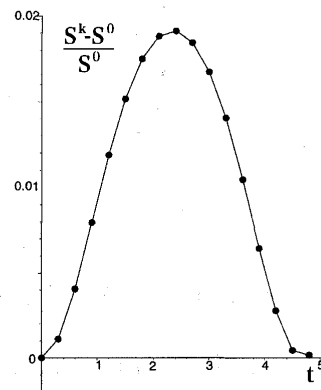


図16 面積の変化：EP₂

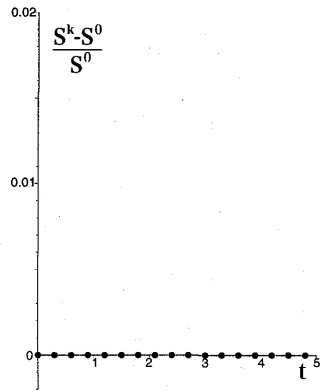


図 17 面積の変化：AP₂

図 18 と図 19 には、6 次の場合のヤコビアンの変化を示した。2 次の場合と異なり AP₆ も EP₆ と同様に変化しているが、一方的に増大または減少することはない。

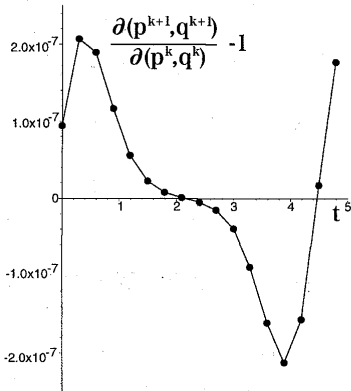


図 18 ヤコビアンの変化：EP₆

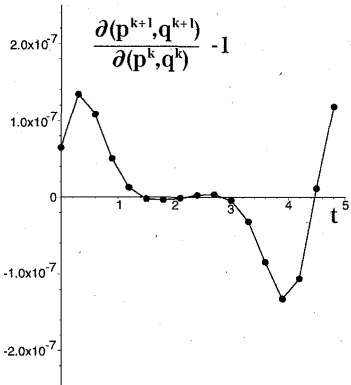


図 19 ヤコビアンの変化：AP₆

表 2 に $2n$ ($n = 1, 2, 3, 4, 5, 6$) 次の $\frac{\partial(p^1, q^1)}{\partial(p^0, q^0)}$ の値を示した。下線部は誤差を表している。AP₂ では誤差はないが、他の場合には誤差があり、高次になるにつれ誤差が小さくなっている。

表 2 ヤコビアン の値と次数

$2n$	$\frac{\partial(p^1, q^1)}{\partial(p^0, q^0)} : EP_{2n}$	$\frac{\partial(p^1, q^1)}{\partial(p^0, q^0)} : AP_{2n}$
2	1.0011042906182741	1.0000000000000000
4	1.0000148079537102	1.0000073546778810
6	1.0000000940771416	1.0000000645455244
8	1.000000003916372	1.000000002600782
10	1.000000000011558	1.000000000007614
12	1.000000000000024	1.000000000000016

4.2 ② : $p^0 = 0, q^0 = \sqrt{2}$ の場合

2 次の場合の解軌道を図 20 と図 21 に示した。EP₂ では数値解が正確に厳密な軌道上にあるが、AP₂ では途中から厳密な軌道から外れている。

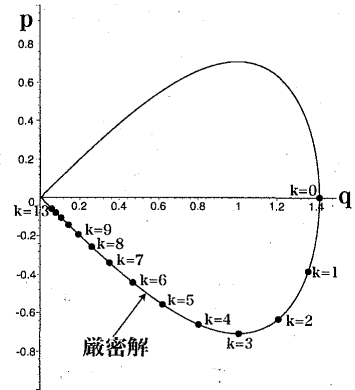


図 20 解軌道：EP₂

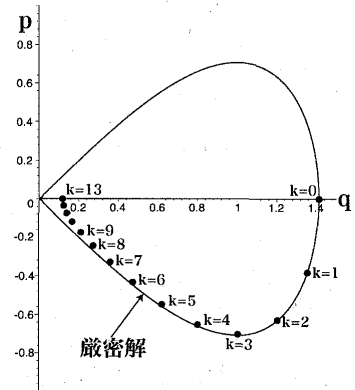


図 21 解軌道：AP₂

6 次の場合の解軌道を図 22 と図 23 に示した。EP₆ と AP₆ でほとんど違いはない。

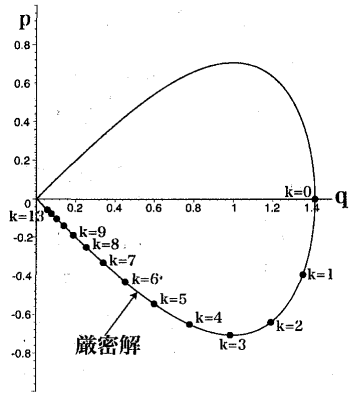


図22 解軌道：EP₆

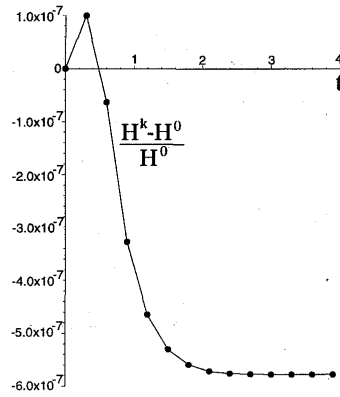


図25 エネルギーの変化：AP₆

図26に2次の場合でEP₂のヤコビアンの変化を示した。ヤコビアンはこの計算時間では1より大きい。図はないが、AP₂ではヤコビアンの変化はない。

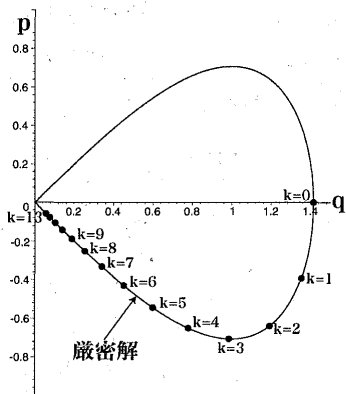


図23 解軌道：AP₆

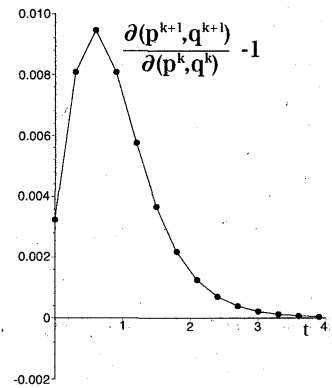


図26 ヤコビアンの変化：EP₂

図24に2次の場合でAP₂のエネルギーの変化を示した。エネルギーはこの計算時間では単調に減少している。図はないが、EP₂ではエネルギーの変化はない。

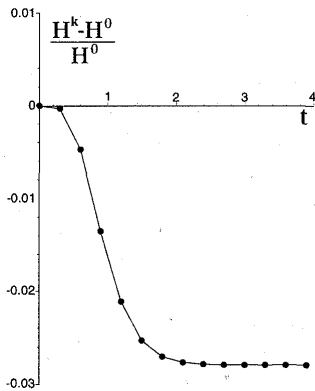


図24 エネルギーの変化：AP₂

①の場合と同様に、図27に2次の場合でEP₂の面積の変化を示した。面積はこの計算時間では単調に増加している。図はないが、AP₂では面積の変化はない。

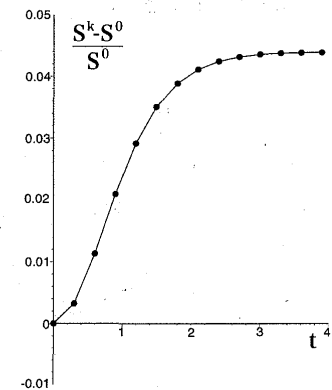


図27 面積の変化：EP₂

図25に6次の場合でAP₆のエネルギーの変化を示した。H¹を除き、AP₂と同様にエネルギーはこの計算時間では単調に減少している。もちろん図はないが、EP₆ではエネルギーの変化はない。

図28と図29には、6次の場合のヤコビアンの変化を示した。2次の場合と異なりAP₆もEP₆と同様に変化している。

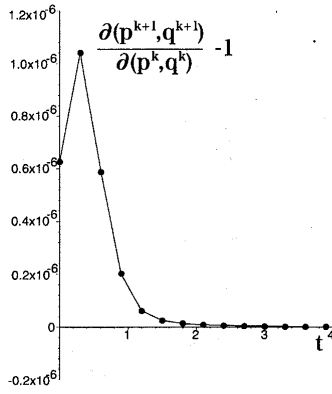


図28 ヤコビアンの変化：EP₆

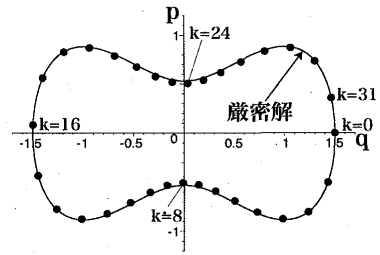


図31 解軌道：AP₂

図32と図33には、AP₂とAP₆の場合のエネルギーの変化を示した。1周期で2回の振動が見られるが、もとの値にもどっている。図はないが、EP₂とEP₆ではエネルギーの変化はない。

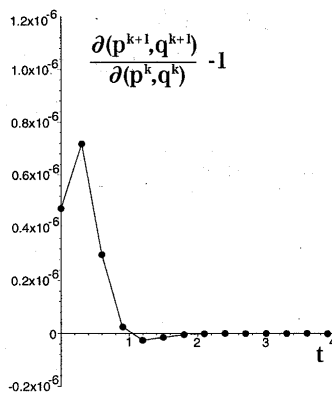


図29 ヤコビアンの変化：AP₆

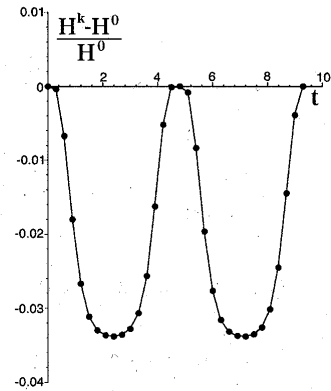


図32 エネルギーの変化：AP₂

4.3 ③ : $p^0 = 0, q^0 = 1.5$ の場合

2次の場合の解軌道を図30と図31に示した。EP₂とAP₂どちらもほぼ同じような軌道である。図はないが、6次の場合もEP₆とAP₆どちらもほぼ同じような軌道で、2次より両者の違いは小さい。

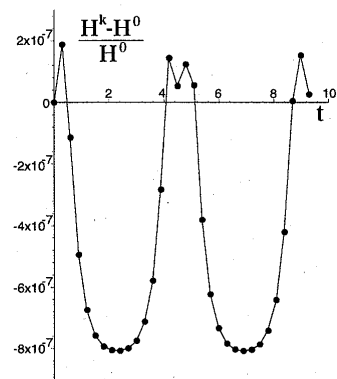


図33 エネルギーの変化：AP₆

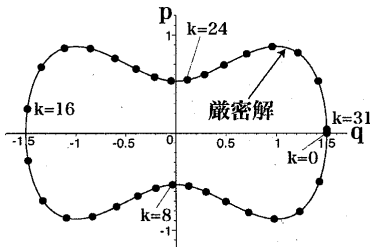


図30 解軌道：EP₂

図34, 図35および図36には、それぞれEP₂, EP₆およびAP₆の場合のヤコビアンの変化を示した。どの場合も同じような変化を示している。図はないが、AP₂では変化はない。

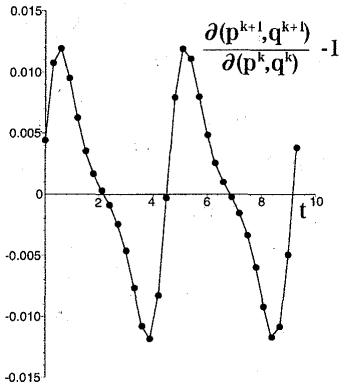


図34 ヤコビアンの変化：EP₂

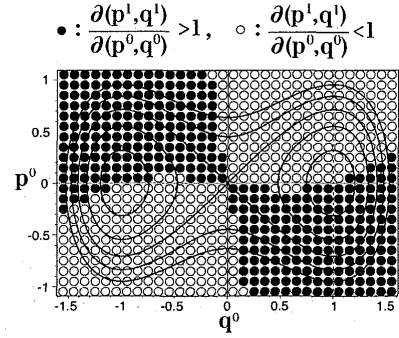


図37 ヤコビアン分布：EP₂

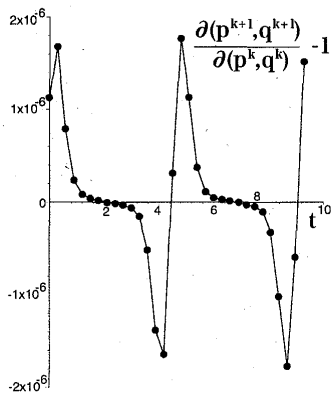


図35 ヤコビアンの変化：EP₆

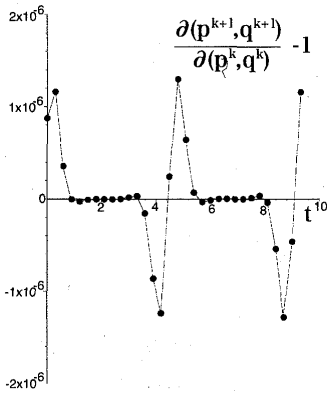


図36 ヤコビアンの変化：AP₆

5. おわりに

本研究では、並列型合成による高次の数値積分法の特徴、特にエネルギー保存や面積保存について調べた。並列型合成として、2次のエネルギー保存スキームを合成する場合と2次の面積保存スキームを合成する場合を考え、調和振動子と非調和振動子に適用した。調和振動子ではどちらのスキームも同じで高次でも低次でもエネルギーと面積の両方が保存した。非調和振動子の結果は表3および表4の通りである。保存しない項目も周期軌道では1周期の間に増減が相殺され平均的にはほぼ一定であり、単調に増加あるいは減少することはなかった。また、高次になるにつれ保存の精度はよくなった。

表3 2次のエネルギー保存スキームの並列合成

保存量	2次	高次
エネルギー	○	○
面積	×	×

表4 2次の面積保存スキームの並列合成

保存量	2次	高次
エネルギー	×	×
面積	○	×

図37にEP₂の場合の位相空間の各点でのヤコビアン値の分布を示した。位相空間は4つの部分に分けられることが分かる。周期軌道では、ヤコビアンが1より大きいところと1より小さいところを同じように通過するので面積は平均的にはほぼ保存される。

参考文献

- [1] E. Hairer, C. Lubich and G. Wanner: *Geometric Numerical Integration, Structure-Preserving Algorithms for Ordinary Differential Equations* (Springer, Berlin, 2006)2nd ed..
- [2] B. Leimkuler and S. Reich: *Simulating Hamiltonian Dynamics* (Cambridge University Press, Cambridge, 2004).
- [3] J.M. Sanz-Serna and M.P. Calvo: *Numerical Hamiltonian Problems* (Chapman & Hall, London, 1994).
- [4] Y. Ishimori: *A high-order energy-conserving integration scheme for Hamiltonian systems*, to be published in Physics Letters A.

付 録

A.1 中点近似の面積保存性

中点近似 (20), (21) を採用したときの 2 次のスキームは

$$p^{k+1} = p^k - \Delta t V' \left(\frac{q^k + q^{k+1}}{2} \right)$$

$$q^{k+1} = q^k + \Delta t T' \left(\frac{p^k + p^{k+1}}{2} \right)$$

である。

$$\frac{\partial p^{k+1}}{\partial p^k} = 1 - \Delta t V'' \times \frac{1}{2} \frac{\partial q^{k+1}}{\partial p^k}$$

$$\frac{\partial p^{k+1}}{\partial q^k} = -\Delta t V'' \times \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\partial q^{k+1}}{\partial q^k} \right)$$

$$\frac{\partial q^{k+1}}{\partial p^k} = \Delta t T'' \times \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\partial p^{k+1}}{\partial p^k} \right)$$

$$\frac{\partial q^{k+1}}{\partial q^k} = 1 + \Delta t T'' \times \frac{1}{2} \frac{\partial p^{k+1}}{\partial q^k}$$

となるので, 整理すれば

$$\frac{\partial p^{k+1}}{\partial p^k} = \frac{1 - \frac{\Delta t^2}{4} T'' V''}{1 + \frac{\Delta t^2}{4} T'' V''}$$

$$\frac{\partial p^{k+1}}{\partial q^k} = \frac{-\Delta t V''}{1 + \frac{\Delta t^2}{4} T'' V''}$$

$$\frac{\partial q^{k+1}}{\partial p^k} = \frac{\Delta t T''}{1 + \frac{\Delta t^2}{4} T'' V''}$$

$$\frac{\partial q^{k+1}}{\partial q^k} = \frac{1 - \frac{\Delta t^2}{4} T'' V''}{1 + \frac{\Delta t^2}{4} T'' V''}$$

である。したがって

$$\frac{\partial(p^{k+1}, q^{k+1})}{\partial(p^k, q^k)} = \frac{\partial p^{k+1}}{\partial p^k} \frac{\partial q^{k+1}}{\partial q^k} - \frac{\partial p^{k+1}}{\partial q^k} \frac{\partial q^{k+1}}{\partial p^k}$$

$$= \frac{(1 - \frac{\Delta t^2}{4} T'' V'')^2 + \Delta t^2 T'' V''}{(1 + \frac{\Delta t^2}{4} T'' V'')^2}$$

$$= \frac{(1 + \frac{\Delta t^2}{4} T'' V'')^2}{(1 + \frac{\Delta t^2}{4} T'' V'')^2} = 1$$

となり面積は保存する。

Checking Preservation of Energy and Area in the Parallel Composition Integrators

Yuji ISHIMORI

Department of Liberal Arts and Sciences, Faculty of Engineering

Summary

We consider the parallel composition schemes as high-order numerical integration methods and apply them to the harmonic and anharmonic oscillators.

Key Words: differential equations, numerical integration, higher order scheme, parallel composition, energy conservation, area preservation