

可変重みを持つ対称な並列型合成法による自由度 2 のハミルトン系に対する高次の全保存数値積分

石森 勇次
(工学部教養教育)

ハミルトンの運動方程式を数値的に解くための高次の数値積分法として、2 次対称スキームの対称な並列合成によるスキームを考える。並列合成する積分路を位数条件の数より 1 つ多く用意して各積分路の重みを可変なものにし、エネルギー以外の保存量も保存するようにステップごとに重みを調整することを試みる。具体的な数値計算例として、ある自由度 2 の超可積分系を調べる。

キーワード：ハミルトン系、対称な並列型合成法、可変重み、全保存数値積分、高次の精度

1. はじめに

ハミルトンの運動方程式に対する高次の数値積分法として、対称な 2 次スキームを対称な形で並列に連結する方法（対称な並列型合成法：図 1）を最近提案した [1-2]。この方法は、図 1 のように n 個の 2 次積分路を並列に合成し、各積分路の重みを全体の精度が $2n$ 次になるように選ぶ方法である。もしベースとなる 2 次積分がエネルギー保存積分であれば、並列合成したスキームもエネルギー保存積分となる。

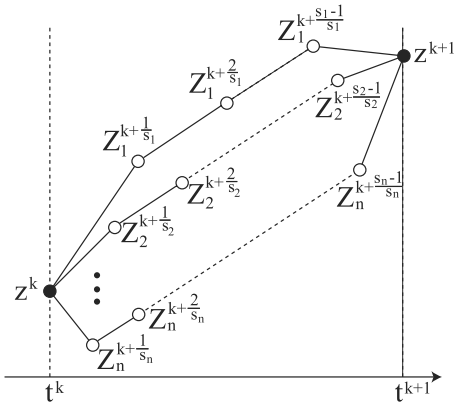


図 1 固定重みをもつ並列型合成法

ハミルトン系には、その解軌道の特徴がエネルギー H 以外の保存量 Θ と緊密に関係するような場合がある。そのような場合、数値積分法としてはエネルギー以外の保存量 Θ の保存が非常に重要になる。

本論文では、図 2 のように $n+1$ 個の 2 次積分路を並列に合成し、1 番目から n 番目の積分路の重みを精度が $2n$ 次になるように選び、残った $n+1$ 番目の積分路の重みは変数として、計算の各ステップごとにエネルギー H 以外の保存量 Θ を保存するように調整する方法を提案する。数値計算例としては、この可変重みをもつ並列型合成法をある 2 自由度の超可積分系に適用し、その数値解の特徴をみる。

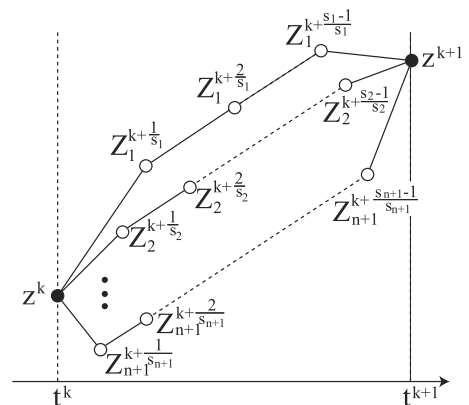


図 2 可変重みをもつ並列型合成法

2. 可変重みをもつ並列型合成法

2.1 ハミルトンの運動方程式の積分表示

ハミルトンの運動方程式は d 個の正準変数の組

$$z = (p_1, p_2, \dots, p_d, q_1, q_2, \dots, q_d)^T \quad (1)$$

の関数であるハミルトニアン (エネルギー関数) を

$$H = H(z) \quad (2)$$

として、微分方程式

$$\frac{dz}{dt} = \sigma_d \nabla_z H \quad (3)$$

で与えられる。ここで

$$\nabla_z = \left(\frac{\partial}{\partial p_1}, \dots, \frac{\partial}{\partial p_d}, \frac{\partial}{\partial q_1}, \dots, \frac{\partial}{\partial q_d} \right)^T \quad (4)$$

$$\sigma_d = \begin{pmatrix} O_d & -I_d \\ I_d & O_d \end{pmatrix} \quad (5)$$

である。 O_d および I_d はそれぞれ d 次の正方ゼロ行列および単位行列である。

刻み幅を Δt とし、離散時間

$$t^k = k\Delta t \quad (6)$$

$$k = 0, 1, 2, \dots \quad (7)$$

での $z(t^k)$ の数値解を z^k と表す。微分方程式 (3) を区間 $[t^k, t^{k+1}]$ で積分すると、積分表示

$$z(t^{k+1}) = z(t^k) + \int_{t^k}^{t^{k+1}} \sigma_d \nabla_z H(z(t)) dt \quad (8)$$

を得る。積分表示 (7) の右辺の積分をどのように近似するのかによって、さまざまな数値積分法を構成することができる。

2.2 対称な並列型合成法

$n+1$ 個の多段 2 次のスキームを並列に合成する [1,2]。それぞれ段数を

$$s_1 < s_2 < \dots < s_n < s_{n+1} \quad (9)$$

となる任意の正の整数として、中間変数を区間 $[t^k, t^{k+1}]$ を s_j ($j = 1, \dots, n+1$) 等分した時間での値として

$$Z_j^{k+\frac{m}{s_j}} \quad (10)$$

$$m = 1, \dots, s_j - 1 \quad (11)$$

$$j = 1, \dots, n+1 \quad (12)$$

で表す。

s_j 段 2 次の積分路を重み c_j で並列に連結すると、 z^{k+1} と上記の中間変数との関係は以下の通りである：

$$z^{k+1} = z^k + \sum_{j=1}^{n+1} c_j \sum_{m=1}^{s_j} I_j^{\frac{m}{s_j}, \frac{m-1}{s_j}} \quad (13)$$

$$Z_j^{k+\frac{m}{s_j}} = \frac{s_j - m}{s_j} (z^k + \sum_{l=1}^m I_j^{\frac{l}{s_j}, \frac{l-1}{s_j}}) + \frac{m}{s_j} (z^{k+1} - \sum_{l=m+1}^{s_j} I_j^{\frac{l}{s_j}, \frac{l-1}{s_j}}) \quad (14)$$

$$Z_j^k = z^k, Z_j^{k+1} = z^{k+1} \quad (15)$$

ここで

$$I_j^{b,a} = (b-a)\Delta t \sigma_d \nabla_z^{b,a} H(Z_j^k) \quad (16)$$

であり、これは

$$\sigma_d \int_{t^{k+a}}^{t^{k+b}} \nabla_z H(z(t)) dt \quad (17)$$

を離散化したものである。また $\nabla_z^{b,a}$ は離散勾配演算子を表し、対称性

$$\nabla^{a,b} = \nabla^{b,a} \quad (18)$$

をもつとき、(16) は 2 次の積分近似となる。さらに離散連鎖則

$$F(z^{k+b}) - F(z^{k+a}) \quad (19)$$

$$= (\nabla_z^{b,a} H(z^k))^T (z^{k+b} - z^{k+a}) \quad (20)$$

が成り立つ場合、並列型合成法はエネルギー保存積分法となり離散エネルギー保存則

$$H(z^{k+1}) - H(z^k) = 0 \quad (21)$$

が成り立つ。

2.3 位数条件と重みの相互関係

計算精度の位数条件 [1,2] を用いて、重み c_1, c_2, \dots, c_n を重み c_{n+1} で表す。すなわち 2 次から $2n$ 次の位数条件は n 個あるので、 n 個の未知数 c_1, c_2, \dots, c_n に対する連立 1 次方程式：

$$2 \text{ 次の条件 : } \sum_{j=1}^{n+1} c_j = 1 \quad (22)$$

$$4 \text{ 次の条件 : } \sum_{j=1}^{n+1} \frac{1}{s_j^2} c_j = 0 \quad (23)$$

⋮

$$2n \text{ 次の条件 : } \sum_{j=1}^{n+1} \frac{1}{s_j^{2n-2}} c_j = 0 \quad (24)$$

の解を求めれば、 c_1, c_2, \dots, c_n を c_{n+1} で表すことができる。なお、もし c_{n+1} を

$$(2n+2) \text{ 次の条件 : } \sum_{j=1}^{n+1} \frac{1}{s_j^{2n}} c_j = 0 \quad (25)$$

が成り立つように、すなわち

$$c_{n+1} = \frac{s_{n+1}^{2n}}{\prod_{l=1}^n (s_{n+1}^2 - s_l^2)} \quad (26)$$

と選んだなら、精度は $(2n+2)$ 次となる。

具体的に3節で議論する計算例の場合

$$s_j = j \quad (27)$$

を考える。この場合、 $n = 1, 2, 3$ について重みはそれぞれ次のようになる。ただし、 c_{n+1} は変数なので c_{n+1}^k と表した。

$n = 1$ の場合：

$$c_1 = 1 - c_2^k \quad (28)$$

$$c_2^k = \frac{4}{3} \text{ ならば 4 次の精度} \quad (29)$$

$n = 2$ の場合：

$$c_1 = -\frac{1}{3} + \frac{5}{27} c_3^k \quad (30)$$

$$c_2 = \frac{4}{3} - \frac{32}{27} c_3^k \quad (31)$$

$$c_3^k = \frac{81}{40} \text{ ならば 6 次の精度} \quad (32)$$

$n = 3$ の場合：

$$c_1 = \frac{1}{24} - \frac{7}{512} c_4^k \quad (33)$$

$$c_2 = -\frac{16}{15} + \frac{7}{16} c_4^k \quad (34)$$

$$c_3 = \frac{81}{40} - \frac{729}{512} c_4^k \quad (35)$$

$$c_4^k = \frac{1024}{315} \text{ ならば 8 次の精度} \quad (36)$$

重み c_{n+1}^k は、エネルギー以外の保存量 $\Theta(z)$ が保存するように、すなわち

$$\Theta(z^{k+1}) - \Theta(z^k) = 0 \quad (37)$$

となるように各ステップごとに定める。

3. 数値計算例

計算例として、自由度2 ($d=2$) の調和振動子を考える。ハミルトン関数 H は

$$H = H_1(p_1, q_1) + H_2(p_2, q_2) \quad (38)$$

のように分離型で、それぞれ

$$H_1(p_1, q_1) = \frac{1}{2}(p_1^2 + q_1^2) \quad (39)$$

$$H_2(p_2, q_2) = \frac{1}{2}(p_2^2 + \frac{1}{4}q_2^2) \quad (40)$$

とする。この場合、振動子1と振動子2の周期の比は1:2で有理数の比である。運動方程式は

$$\frac{dp_1}{dt} = -q_1, \quad \frac{dq_1}{dt} = p_1 \quad (41)$$

$$\frac{dp_2}{dt} = -\frac{1}{4}q_2, \quad \frac{dq_2}{dt} = p_2 \quad (42)$$

となる。2つのエネルギー H_1, H_2 はそれぞれ保存し、保存則

$$\frac{dH_1(p_1, q_1)}{dt} = 0 \quad (43)$$

$$\frac{dH_2(p_2, q_2)}{dt} = 0 \quad (44)$$

が成り立つ。

この系は周期の比が有理数の比であることから、エネルギー以外に第3の保存量

$$\Theta(p_1, p_2, q_1, q_2) = p_1(4p_2^2 - q_2^2) + 4p_2q_1q_2 \quad (45)$$

もち、保存則

$$\frac{d\Theta(p_1, p_2, q_1, q_2)}{dt} = 0 \quad (46)$$

が成り立ち、超可積分系と呼ばれる [3]。これら3個の保存量によって、 (q_1, q_2) 平面上の軌道は1つの閉じた曲線となる。実際、厳密解

$$p_1(t) = p_1(0) \cos t - q_1(0) \sin t \quad (47)$$

$$q_1(t) = p_1(0) \sin t + q_1(0) \cos t \quad (48)$$

$$p_2(t) = p_2(0) \cos \frac{1}{2}t - \frac{1}{2}q_2(0) \sin \frac{1}{2}t \quad (49)$$

$$q_2(t) = 2p_2(0) \sin \frac{1}{2}t + q_2(0) \cos \frac{1}{2}t \quad (50)$$

を、初期条件

$$p_1(0) = 1, \quad q_1(0) = 0 \quad (51)$$

$$p_2(0) = 0.5, \quad q_2(0) = 0 \quad (52)$$

のもとで (q_1, q_2) 平面上に描くと、図3のような解軌道となる。これは基本周期 4π の周期軌道である。

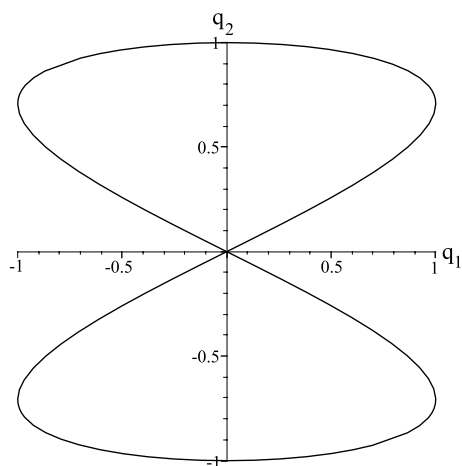


図3 厳密な解軌道

数値計算では、2節で述べたように段数は $s_j = j$ にとった。また特に指摘しない限り、刻み幅 $\Delta t = \frac{4\pi}{40}$ 、計算時間 $T_c = 10 \times 4\pi$ (10 周期) とした。この場合、計算回数 K_c は $K_c = T_c / \Delta t = 400$ ステップとなる。

なお、省略記号として、 H_1 と H_2 を保存する $2n$ 次の並列型合成法を EC_{2n} 、 H_1 、 H_2 、 Θ の全てを保存する $2n$ 次の並列型合成法を TC_{2n} と表す。

図4に EC_2 を用いたときの数値解を示す。軌道は1つの閉曲線上ではなく平面上に広がっている。この場合の第3保存量 Θ の時間依存性を図5に示す。 Θ は保存されず時間の経過とともに単調に減少している。この Θ の非保存性が軌道の広がりの原因となっていると考えられる。

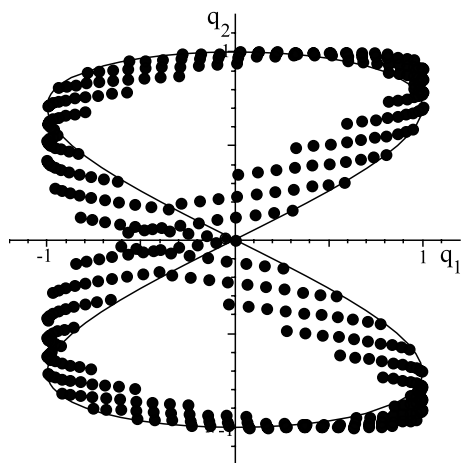


図4 数値解： EC_2

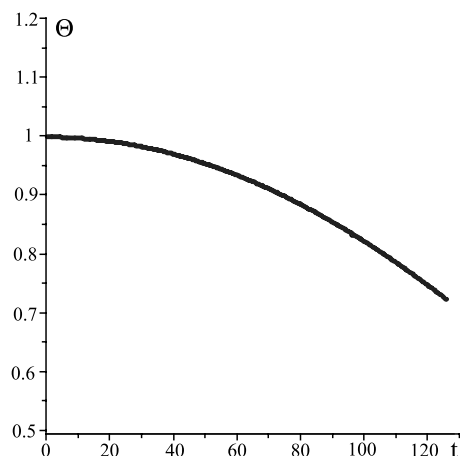


図5 Θ の時間依存性： EC_2

図6に TC_2 を用いたときの数値解を示す。軌道は EC_2 と異なり1つの閉曲線上にある。また当然ではあるが、第3保存量 Θ は図7に示すように一定の値である。

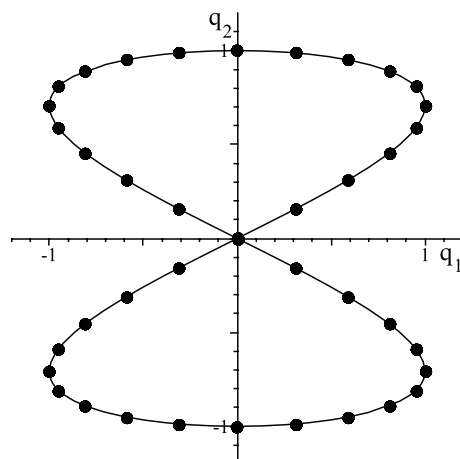


図6 数値解： TC_2

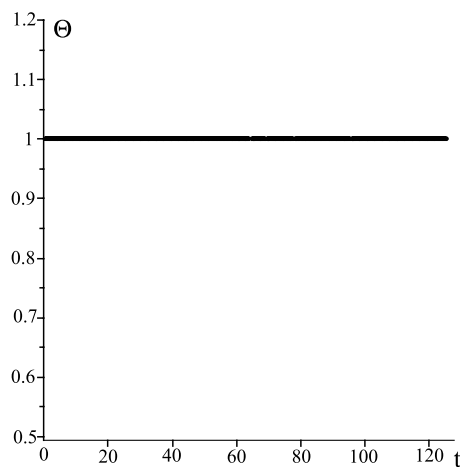


図7 Θ の時間依存性： TC_2

TC₂ のときの可変重み c_2^k の時間依存性を図 8 に示す。可変重み c_2^k の値は、EC₄ のときの固定重み $c_2 = \frac{4}{3} = 1.333\dots$ に非常に近い値である。

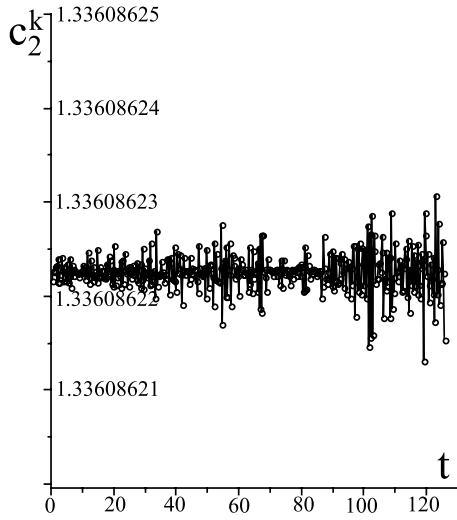


図 8 c_2^k の時間依存性：TC₂

図 9 に EC₄ を用いたときの数値解を示す。このスケールでは、解軌道はほとんど図 6 の TC₂ を用いたときの解軌道と区別がつかない。

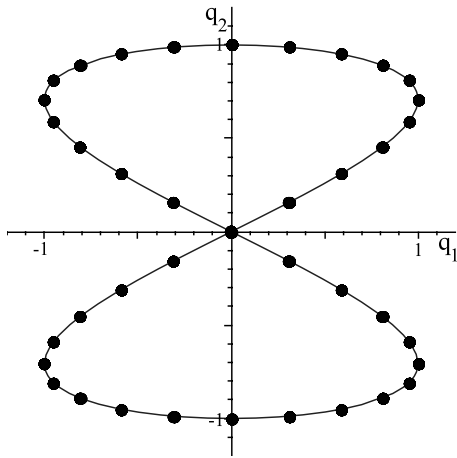


図 9 数値解：EC₄

EC₄ および TC₂ を用いたときの数値解において、原点 (0, 0) 付近の解軌道の様子を図 10 に示す。初期値以外の EC₄ の軌道点は、原点付近にもどるごとに厳密な軌道曲線上から離れていくことがわかる。一方、TC₂ の軌道点は常に厳密な軌道曲線上にある。したがって長時間の計算をすれば EC₄ と TC₂ の違いは明確になると思われる。

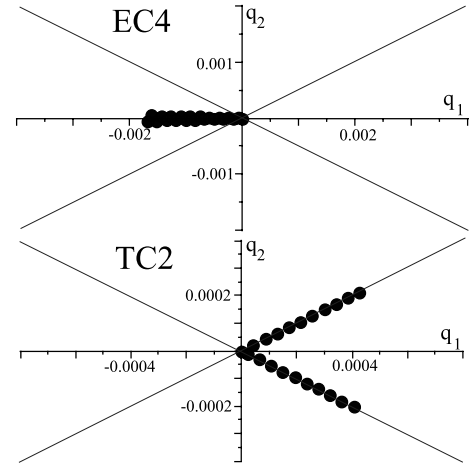


図 10 数値解：EC₄ および TC₂

数値解の局所誤差を

$$e(t^k) = |z^k - z(t^k)| \quad (53)$$

で定義する。

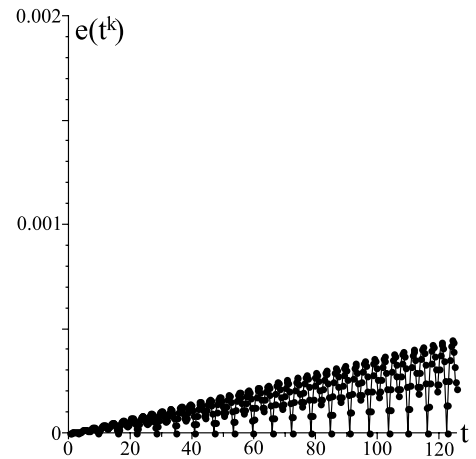


図 11 局所誤差：TC₂

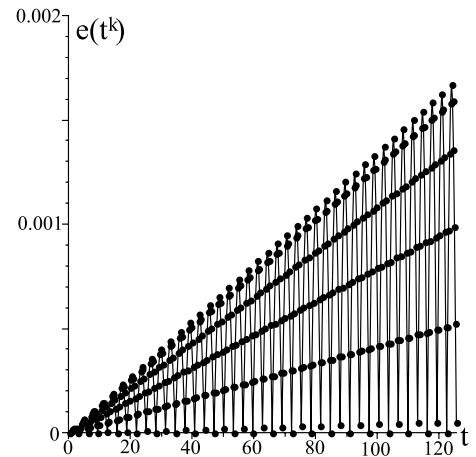


図 12 局所誤差：EC₄

図 11 および図 12 にそれぞれ TC₂ および EC₄ の数値解の局所誤差を示す。意外なことに TC₂ の誤差の方が EC₄ の誤差より小さいことがわかる。

大域誤差を

$$e_{\max}(T_c) = \max\{e(t^k)\}_{k=1,2,\dots,K_c} \quad (54)$$

で定義する。 $T_c = 4\pi$ のときの大域誤差 $e_{\max}(T_c)$ と刻み幅 Δt の関係を図 1 3 に示す。EC $_{2n+2}$ と TC $_{2n}$ が同じ刻み幅依存性をもっていることがわかる。すなわち同じ $2n+2$ 次の精度をもつことがわかる。ただし値としては、TC $_{2n}$ の方が EC $_{2n+2}$ より精度がよい。この傾向は図 1 1 と図 1 2 でもみられた。

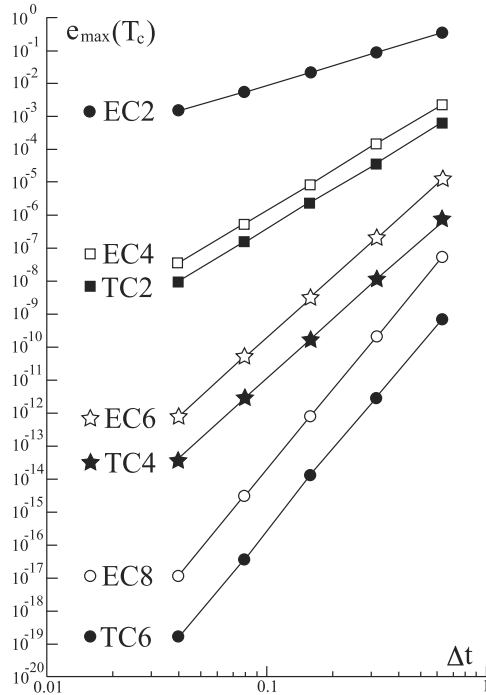


図 1 3 大域誤差と刻み幅 : $T_c = 4\pi$

図 8 でみたように、可変重み c_2^k (TC $_2$) の値は固定重み $c_2 = \frac{4}{3}$ (EC $_4$) に近かった。そこで c_{n+1}^k (TC $_{2n}$) と c_{n+1} (EC $_{2n+2}$) の大域的な差 $d_{\max}(T_c)$ を

$$d_{\max}(T_c) = \max\{|c_{n+1}^k - c_{n+1}|\}_{k=1,2,\dots,K_c} \quad (55)$$

で定義する。図 1 4 に $T_c = 4\pi$, $n = 1$ のときの重みの大域的な差 $d_{\max}(T_c)$ と刻み幅 Δt の関係を示す。このグラフから

$$d_{\max}(T_c) \sim \Delta t^2 \quad (56)$$

であることがよみとれる。このことは、 $n = 2$ と $n = 3$ の場合でも同じであった。したがって

$$c_{n+1}^k = c_{n+1} + O(\Delta t^2) \quad (57)$$

である。このことから、 $2n+2$ 次の条件 (25) が近似的に成り立ち、その誤差は次の位数に寄与する。すなわち、TC $_{2n}$ と EC $_{2n+2}$ は同じ $(2n+2)$ 次の精度をもつといえる。このことが図 1 3 の結果となったと考えられる。

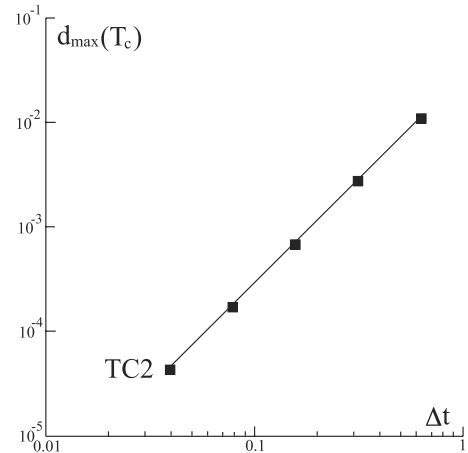


図 1 4 重みの大域的な差と刻み幅

4. おわりに

本研究ではハミルトンの運動方程式に対して、エネルギーとそれ以外の 1 つの保存量を保存する高次の数値積分法として、可変重みをもつ対称な並列型合成法を提案した。 $(n+1)$ 個の積分路の重みのなかで、自由に重みを変えられる 1 つの重みを、エネルギー H の保存則に加えて別の量 Θ の保存則が成り立つように調整すれば、 H も Θ も保存する $(2n+2)$ 次の積分法となることが数値計算例を通じて示された。なお積分路の数を増やして、 H 以外の 2 個以上の保存量を保存させる積分法へと拡張することは今後の課題である。

参考文献

- [1] Y. Ishimori : A high-order energy-conserving integration scheme for Hamiltonian systems, Phys. Lett. A, **372** (2008) 1562-1573.
- [2] 石森勇次 : 非自励ハミルトン系のエネルギーの変化を高次の精度で計算する数値積分法, 日本応用数理学会論文誌, Vol.19, No.2 (2009) 183-203.
- [3] Y. Yoshida : Non-existence of the modified first integral by symplectic integration methods, Phys. Lett. A, **282** (2001) 276-283.

High-Order Totally Conservative Numerical Integrations of Hamiltonian Equations with Two Degrees of Freedom Using A Parallel Composition Method with Variable Weights

Yuji ISHIMORI

Department of Liberal Arts and Sciences, Faculty of Engineering

Summary

We propose a parallel composition scheme as a high-order totally conservative numerical integration method for Hamiltonian systems having an extra conserved quantity besides the energy and study its properties by doing numerical experiments for the two-dimensional harmonic oscillator with a rational frequency which is super-integrable.

Key Words: Hamiltonian systems, totally conservative integration, parallel composition method, variable weights, high-order scheme