可変重みを持つ非対称な並列型合成法による高次のエネルギー保存数値積分 ～調和振動子を例として～

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次の対称なスキームの非対称な並列合成によるスキームを考える。調和振動子を例として，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，エネルギーが保存するように重みを調整することを試みる。

キーワード：ハミルトン系，非対称な並列型合成，可変重み，エネルギー保存数値積分，高次の精度

１．はじめに

常微分方程式に対する高次の数値積分法として，対称な２次のスキームを直列に合成したものを単純に並列合成する方法，即ち非対称な形で並列に連結する方法（非対称な並列型合成法：図１）を最近提案した [1]。この方法は，図１のように n 個の２次の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。この方法では，もしベースとなる２次の積分がエネルギー保存積分であっても，並列合成したスキームもエネルギー保存積分となるわけではない。

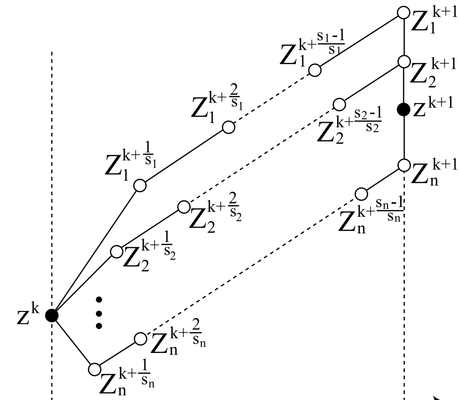

図１　固定重みをもつ非対称な並列型合成法

本論文では，図２のように $n+1$ 個の２次の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 を保存するように調整する方法を提案する。具体例として調和振動子を考え，この方法の特徴を調べる。

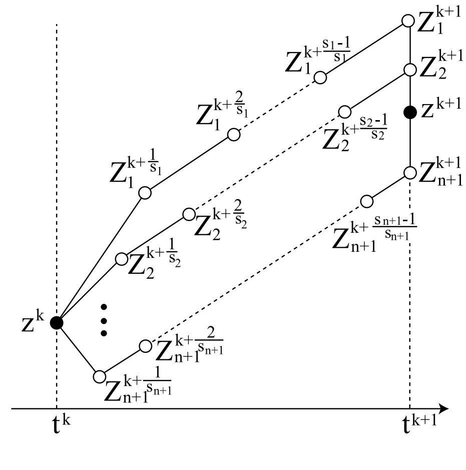

図２　可変重みをもつ非対称な並列型合成法

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

$$z = (p_1, p_2, \ldots, p_d, q_1, q_2, \ldots, q_d)^T \tag{1}$$

の関数であるハミルトニアン（エネルギー関数）を

$$H = H(z) \tag{2}$$

として，微分方程式

$$\frac{dz}{dt} = \sigma_d \nabla_z H \tag{3}$$

で与えられる。ここで

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

$$\sigma_d = \begin{pmatrix} O_d & -I_d \\ I_d & O_d \end{pmatrix} \tag{5}$$

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

$$t^k = k\Delta t \tag{6}$$

$$k = 0, 1, 2, \ldots \tag{7}$$

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

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

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 非対称な並列型合成法

$n+1$ 個の多段２次のスキームを単純な形で並列に合成する [1]。それぞれ段数を

$$s_1 < s_2 < \cdots < s_n < s_{n+1} \tag{9}$$

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 $(j = 1, \ldots, n+1)$ 等分した時間での値として

$$Z_j^{k+\frac{m}{s_j}} \tag{10}$$

$$(j = 1, 2, \cdots, n+1; m = 1, 2, \cdots, s_j) \tag{11}$$

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：

$$z^{k+1} = \sum_{j=1}^{n+1} c_j Z_j^{k+1} \tag{12}$$

$$Z_j^{k+\frac{m}{s_j}} = Z_j^{k+\frac{m-1}{s_j}} + I_j^{\frac{m}{s_j}, \frac{m-1}{s_j}} \tag{13}$$

$$(j = 1, 2, \cdots, n+1; m = 1, 2, \cdots, s_j) \tag{14}$$

ここで

$$I_j^{b,a} = (b-a)\Delta t \sigma_d \nabla_z^{b,a} H(Z_j^k) \tag{15}$$

であり，これは

$$\sigma_d \int_{t^{k+a}}^{t^{k+b}} \nabla_z H(z(t))dt \tag{16}$$

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

$$\nabla^{a,b} = \nabla^{b,a} \tag{17}$$

をもつとき，(15) は２次の積分近似となる。

2.3 位数条件と重みの相互関係

計算精度の位数条件を用いて，重み $c_1, c_2, \ldots, c_n$ を重み c_{n+1} で表す [1]。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 $c_1, c_2, \ldots, c_n$ に対する連立１次方程式：

$$２次の条件：\sum_{j=1}^{n+1} c_j = 1 \tag{18}$$

$$４次の条件：\sum_{j=1}^{n+1} \frac{1}{s_j^2} c_j = 0 \tag{19}$$

$$\vdots$$

$$2n\ 次の条件：\sum_{j=1}^{n+1} \frac{1}{s_j^{2n-2}} c_j = 0 \tag{20}$$

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

$$(2n+2)\ 次の条件：\sum_{j=1}^{n+1} \frac{1}{s_j^{2n}} c_j = 0 \tag{21}$$

が成り立つように，すなわち

$$c_{n+1} = \frac{s_{n+1}^{2n}}{\displaystyle\prod_{l=1}^{n} (s_{n+1}^2 - s_l^2)} \tag{22}$$

と選んだなら，精度は $(2n+2)$ 次となる。

例えば

$$s_j = j \tag{23}$$

とした場合，$n = 1, 2, 3$ について重みはそれぞれ次のようになる。

$n = 1$ の場合：

$$c_1 = 1 - c_2 \tag{24}$$

$$c_2 = \frac{4}{3}\ ならば４次の精度 \tag{25}$$

$n=2$ の場合：

$$c_1 = -\frac{1}{3} + \frac{5}{27}c_3 \tag{26}$$
$$c_2 = \frac{4}{3} - \frac{32}{27}c_3 \tag{27}$$
$$c_3 = \frac{81}{40} \text{ ならば６次の精度} \tag{28}$$

$n=3$ の場合：

$$c_1 = \frac{1}{24} - \frac{7}{512}c_4 \tag{29}$$
$$c_2 = -\frac{16}{15} + \frac{7}{16}c_4 \tag{30}$$
$$c_3 = \frac{81}{40} - \frac{729}{512}c_4 \tag{31}$$
$$c_4 = \frac{1024}{315} \text{ ならば８次の精度} \tag{32}$$

重み c_{n+1} は，エネルギー $H(z)$ が保存するように，すなわち

$$H(z^{k+1}) = H(z^k) \tag{33}$$

となるように定める。

３．調和振動子

3.1 調和振動子のエネルギー保存条件

例として，自由度１（$d=1,\ z=(p,q)^T$）の調和振動子を考える。ハミルトン関数 H は

$$H = H(p,q) = \frac{1}{2}(p^2+q^2) \tag{34}$$

で与えられ，運動方程式は

$$\frac{dp}{dt} = -q \tag{35}$$
$$\frac{dq}{dt} = p \tag{36}$$

となる。エネルギー H は保存し，保存則

$$\frac{dH(p,q)}{dt} = 0 \tag{37}$$

が成り立つ。

運動方程式 (35), (36) の厳密解は

$$p(t) = p(0)\cos t - q(0)\sin t \tag{38}$$
$$q(t) = p(0)\sin t + q(0)\cos t \tag{39}$$

であり，行列表示では

$$\begin{pmatrix} p(t) \\ q(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos t & -\sin t \\ \sin t & \cos t \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p(0) \\ q(0) \end{pmatrix} \tag{40}$$

である。これを

$$z(t) = \phi(t)z(0) \tag{41}$$
$$\phi(t) = \begin{pmatrix} \cos t & -\sin t \\ \sin t & \cos t \end{pmatrix} \tag{42}$$

と表す。エネルギー保存は

$$\phi(t)^T\phi(t) = I \text{ (単位行列)} \tag{43}$$

より

$$\begin{aligned} H(z(t)) &= \frac{1}{2}z(t)^T z(t) \\ &= \frac{1}{2}z(0)^T\phi(t)^T\phi(t)z(0) \\ &= \frac{1}{2}z(0)^T z(0) = H(z(0)) \end{aligned} \tag{44}$$

となることにより保証されている。

数値計算スキーム

$$z^{k+1} = \Phi(\Delta t)z^k \tag{45}$$

においても，行列 $\Phi(\Delta t)$ が条件

$$\Phi(\Delta t)^T\Phi(\Delta t) = I \tag{46}$$

を満たせばエネルギーは保存する。即ちエネルギー保存条件 (33) は，調和振動子では条件 (46) を考えればよい。

3.2 $(n+1)$ 個の２次の積分路

ここでは，単独ではエネルギーが保存する多段２次の積分路を並列に合成する。s_j 段２次の積分路において行列 $\Phi_j(\Delta t)$ を

$$Z_j^{k+1} = \Phi_j(\Delta t)z^k \tag{47}$$

のように定義する。１段２次の場合

$$\Phi_1(\Delta t) = \begin{pmatrix} \dfrac{1-\Delta t^2/4}{1+\Delta t^2/4} & -\dfrac{\Delta t}{1+t^2/4} \\ \dfrac{\Delta t}{1+\Delta t^2/4} & \dfrac{1-\Delta t^2/4}{1+\Delta t^2/4} \end{pmatrix} \tag{48}$$

で与えられる [2]。

$$\left(\frac{1-\Delta t^2/4}{1+\Delta t^2/4}\right)^2 + \left(\frac{\Delta t}{1+\Delta t^2/4}\right)^2 = 1 \tag{49}$$

よりエネルギー保存条件

$$\Phi_1(\Delta t)^T\Phi_1(\Delta t) = I \tag{50}$$

が成り立つ。行列 $\Phi_1(\Delta t)$ は

$$\Delta\tau = 2\tan^{-1}\left(\frac{\Delta t}{2}\right) \tag{51}$$

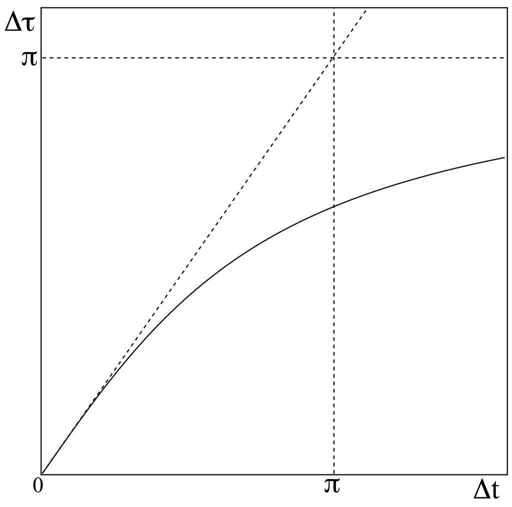

図３　Δt と $\Delta\tau$

を用いると

$$\Delta t = 2\tan\left(\frac{\Delta\tau}{2}\right) = \frac{2\sin\left(\frac{\Delta\tau}{2}\right)\cos\left(\frac{\Delta\tau}{2}\right)}{\cos^2\left(\frac{\Delta\tau}{2}\right)} = \frac{\sin\Delta\tau}{\cos^2\left(\frac{\Delta\tau}{2}\right)} \tag{52}$$

$$1+\frac{\Delta t^2}{4} = 1+\tan^2\left(\frac{\Delta\tau}{2}\right) = \frac{\cos^2\left(\frac{\Delta\tau}{2}\right)+\sin^2\left(\frac{\Delta\tau}{2}\right)}{\cos^2\left(\frac{\Delta\tau}{2}\right)} = \frac{1}{\cos^2\left(\frac{\Delta\tau}{2}\right)} \tag{53}$$

$$1-\frac{\Delta t^2}{4} = 1-\tan^2\left(\frac{\Delta\tau}{2}\right) = \frac{\cos^2\left(\frac{\Delta\tau}{2}\right)-\sin^2\left(\frac{\Delta\tau}{2}\right)}{\cos^2\left(\frac{\Delta\tau}{2}\right)} = \frac{\cos\Delta\tau}{\cos^2\left(\frac{\Delta\tau}{2}\right)} \tag{54}$$

より

$$\Phi_1(\Delta t) = \begin{pmatrix} \cos\Delta\tau & -\sin\Delta\tau \\ \sin\Delta\tau & \cos\Delta\tau \end{pmatrix} \tag{55}$$

のように表すことができる。このとき，図３のように

$$\Delta\tau < \Delta t \tag{56}$$

であるから，数値解は厳密解より位相平面上の円軌道をより小さい角度で移動する。

　この行列 $\Phi_1(\Delta t)$ をベースとして s_j 段２次の行列 $\Phi_j(\Delta t)$ は

$$\Phi_j(\Delta t) = \left\{\Phi_1\left(\frac{\Delta t}{s_j}\right)\right\}^{s_j} = \begin{pmatrix} \cos\Delta\tau_j & -\sin\Delta\tau_j \\ \sin\Delta\tau_j & \cos\Delta\tau_j \end{pmatrix} \tag{57}$$

$$\Delta\tau_j = 2s_j\tan^{-1}\left(\frac{\Delta t}{2s_j}\right) \tag{58}$$

$$(j=1,2,\cdots,n+1) \tag{59}$$

のように与えられる。(9), (58) より

$$\Delta\tau_1 < \Delta\tau_2 < \cdots < \Delta\tau_n < \Delta\tau_{n+1} < \Delta t \tag{60}$$

であり，段数が大きい方がより厳密解に近い。なお，$\Delta\tau_j$ を Δt について展開すると

$$\Delta\tau_j = \Delta t - \frac{1}{12s_j^2}\Delta t^3 + \frac{1}{80s_j^4}\Delta t^5 - \frac{1}{448s_j^6}\Delta t^7 + \frac{1}{2304s_j^8}\Delta t^9 + O(\Delta t^{11}) \tag{61}$$

である。また

$$\begin{aligned}\Delta\tau_i - \Delta\tau_j = &-\frac{1}{12}\left(\frac{1}{s_i^2}-\frac{1}{s_j^2}\right)\Delta t^3 \\ &+\frac{1}{80}\left(\frac{1}{s_i^4}-\frac{1}{s_j^4}\right)\Delta t^5 \\ &-\frac{1}{448}\left(\frac{1}{s_i^6}-\frac{1}{s_j^6}\right)\Delta t^7 \\ &+\frac{1}{2304}\left(\frac{1}{s_i^8}-\frac{1}{s_j^8}\right)\Delta t^9 + O(\Delta t^{11})\end{aligned} \tag{62}$$

である。

3.3 並列型合成とエネルギー保存

　行列 $\Phi(\Delta t)$ は

$$\Phi(\Delta t) = \sum_{j=1}^{n+1} c_j\Phi_j(\Delta t) \tag{63}$$

$$= \begin{pmatrix} \sum_{j=1}^{n+1} c_j\cos\Delta\tau_j & -\sum_{j=1}^{n+1} c_j\sin\Delta\tau_j \\ \sum_{j=1}^{n+1} c_j\sin\Delta\tau_j & \sum_{j=1}^{n+1} c_j\cos\Delta\tau_j \end{pmatrix} \tag{64}$$

である。エネルギーが保存するためには，条件 (46) より

$$\left(\sum_{j=1}^{n+1} c_j \cos\Delta\tau_j\right)^2 + \left(\sum_{j=1}^{n+1} c_j \sin\Delta\tau_j\right)^2 = 1 \quad (65)$$

でなければならない。

$n = 1$ の場合

$$\begin{aligned}&(c_1\cos\Delta\tau_1 + c_2\cos\Delta\tau_2)^2\\ +&(c_1\sin\Delta\tau_1 + c_2\sin\Delta\tau_2)^2\\ =&c_1^2 + c_2^2 + 2c_1c_2\cos(\Delta\tau_1 - \Delta\tau_2)\end{aligned} \quad (66)$$

および

$$(c_1 + c_2)^2 = c_1^2 + c_2^2 + 2c_1c_2 = 1 \quad (67)$$

より，エネルギー保存条件 (69) は

$$c_1c_2\{1 - \cos(\Delta\tau_1 - \Delta\tau_2)\} = 0$$

となるが，この条件が成り立つような c_2 ($\neq 0, 1$) は存在しない。この結果は，図４のように円周上（等エネルギー曲線）の２点を結ぶ直線上に，その２点以外の円周上の点がないことからも明らかである。

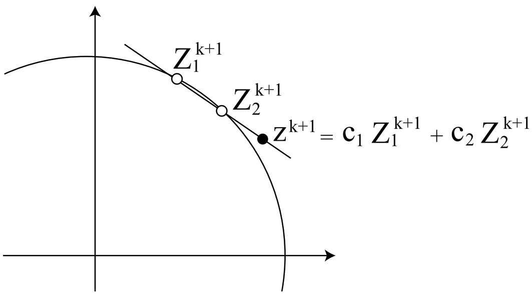

図４　$n = 1$ の場合：エネルギー非保存

$n = 2$ の場合

$$\begin{aligned}&(c_1\cos\Delta\tau_1 + c_2\cos\Delta\tau_2 + c_3\cos\Delta\tau_3)^2\\ +&(c_1\sin\Delta\tau_1 + c_2\sin\Delta\tau_2 + c_3\sin\Delta\tau_3)^2\\ =&c_1^2 + c_2^2 + c_3^2 + 2c_1c_2\cos(\Delta\tau_1 - \Delta\tau_2)\\ &+ 2c_1c_3\cos(\Delta\tau_1 - \Delta\tau_3)\\ &+ 2c_2c_3\cos(\Delta\tau_2 - \Delta\tau_3)\end{aligned} \quad (68)$$

および

$$\begin{aligned}&(c_1 + c_2 + c_3)^2 = c_1^2 + c_2^2 + c_3^2\\ &+ 2c_1c_2 + 2c_1c_3 + 2c_2c_3 = 1\end{aligned} \quad (69)$$

より，エネルギー保存条件 (65) は

$$\begin{aligned}&c_1c_2\{1 - \cos(\Delta\tau_1 - \Delta\tau_2)\}\\ +&c_1c_3\{1 - \cos(\Delta\tau_1 - \Delta\tau_3)\}\\ +&c_2c_3\{1 - \cos(\Delta\tau_2 - \Delta\tau_3)\} = 0\end{aligned} \quad (70)$$

となる。ここで

$$1 - \cos x = \frac{x^2}{2} + O(x^4) \quad (71)$$

および (62) に注意すると，上記のエネルギー保存条件 (70) の主要項は $O(\Delta t^6)$ である。もし主要項のみを考えるならば，エネルギー保存条件 (70) は

$$\begin{aligned}&\frac{\Delta t^6}{288}\left\{c_1c_2\left(\frac{1}{s_1^2} - \frac{1}{s_2^2}\right)^2 + c_1c_3\left(\frac{1}{s_1^2} - \frac{1}{s_3^2}\right)^2\right.\\ &\left.+c_2c_3\left(\frac{1}{s_2^2} - \frac{1}{s_3^2}\right)^2\right\} = O(\Delta t^8)\end{aligned} \quad (72)$$

となる。即ち６次の精度内（誤差は８次）で

$$\begin{aligned}&c_1c_2\left(\frac{1}{s_1^2} - \frac{1}{s_2^2}\right)^2 + c_1c_3\left(\frac{1}{s_1^2} - \frac{1}{s_3^2}\right)^2\\ &+ c_2c_3\left(\frac{1}{s_2^2} - \frac{1}{s_3^2}\right)^2 = 0\end{aligned} \quad (73)$$

がエネルギー保存条件となる。(73) を変形すると

$$\begin{aligned}&c_1c_2\left(\frac{1}{s_1^4} + \frac{1}{s_2^4} - \frac{2}{s_1^2s_2^2}\right)\\ +&c_1c_3\left(\frac{1}{s_1^4} + \frac{1}{s_3^4} - \frac{2}{s_1^2s_3^2}\right)\\ +&c_2c_3\left(\frac{1}{s_2^4} + \frac{1}{s_3^4} - \frac{2}{s_2^2s_3^2}\right)\\ =&c_1c_2\left(\frac{1}{s_1^4} + \frac{1}{s_2^4}\right)\\ +&c_1c_3\left(\frac{1}{s_1^4} + \frac{1}{s_3^4}\right)\\ +&c_2c_3\left(\frac{1}{s_2^4} + \frac{1}{s_3^4}\right)\\ -&\frac{1}{s_1^2}c_1\left(\frac{1}{s_1^2}c_1 + \frac{1}{s_2^2}c_2 + \frac{1}{s_3^2}c_3\right) + \frac{1}{s_1^4}c_1^2\\ -&\frac{1}{s_2^2}c_2\left(\frac{1}{s_1^2}c_1 + \frac{1}{s_2^2}c_2 + \frac{1}{s_3^2}c_3\right) + \frac{1}{s_2^4}c_2^2\\ -&\frac{1}{s_3^2}c_3\left(\frac{1}{s_1^2}c_1 + \frac{1}{s_2^2}c_2 + \frac{1}{s_3^2}c_3\right) + \frac{1}{s_3^4}c_3^2\\ =&c_1\left(\frac{1}{s_1^4}c_1 + \frac{1}{s_2^4}c_2 + \frac{1}{s_3^4}c_3\right)\\ +&c_2\left(\frac{1}{s_1^4}c_1 + \frac{1}{s_2^4}c_2 + \frac{1}{s_3^4}c_3\right)\\ +&c_3\left(\frac{1}{s_1^4}c_1 + \frac{1}{s_2^4}c_2 + \frac{1}{s_3^4}c_3\right)\\ =&\frac{1}{s_1^4}c_1 + \frac{1}{s_2^4}c_2 + \frac{1}{s_3^4}c_3 = 0\end{aligned} \quad (74)$$

となる。ここで，２次の条件 (18) と４次の条件 (19) を用いた。(74) は６次の条件であり，エネルギーを保存するように c_3 を決めるとき，その主要項は数値積分の精度が６次になることを意味し，誤差は次の８次の項に寄

与する。即ち段数を (23) のように $s_j = j$ とするとき，Δt が十分小さければ c_3 は6次のときの値 $\dfrac{81}{40} = 2.025$ に近い値をとる。実際 $\Delta t = 0.1$ のとき，エネルギー保存条件 (65) の解として，$c_3 = 2.02567542\cdots$ がある。このように $n = 2$ のときの計算スキームはエネルギーの保存する6次の数値積分法となる（図5参照)。

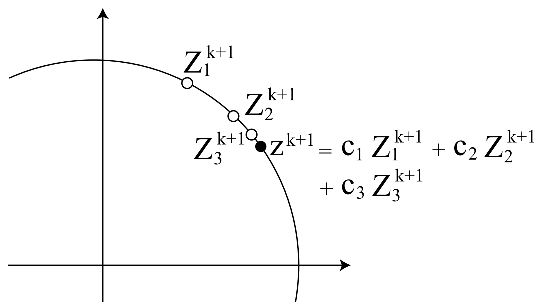

図5　$n = 2$ の場合：エネルギー保存

$n = 3$ の場合

$n = 2$ の場合と同様に考えると，エネルギー保存条件 (65) は

$$
\begin{aligned}
&c_1c_2\{1-\cos(\Delta\tau_1-\Delta\tau_2)\}\\
&+c_1c_3\{1-\cos(\Delta\tau_1-\Delta\tau_3)\}\\
&+c_1c_4\{1-\cos(\Delta\tau_1-\Delta\tau_4)\}\\
&+c_2c_3\{1-\cos(\Delta\tau_2-\Delta\tau_3)\}\\
&+c_2c_4\{1-\cos(\Delta\tau_2-\Delta\tau_4)\}\\
&+c_3c_4\{1-\cos(\Delta\tau_3-\Delta\tau_4)\}=0
\end{aligned}
\tag{75}
$$

となる。(75) を Δt の展開式で表すと

$$
\begin{aligned}
&\frac{\Delta t^6}{288}\left\{c_1c_2\left(\frac{1}{s_1^2}-\frac{1}{s_2^2}\right)^2+c_1c_3\left(\frac{1}{s_1^2}-\frac{1}{s_3^2}\right)^2\right.\\
&\quad+c_1c_4\left(\frac{1}{s_1^2}-\frac{1}{s_4^2}\right)^2+c_2c_3\left(\frac{1}{s_2^2}-\frac{1}{s_3^2}\right)^2\\
&\quad\left.+c_2c_4\left(\frac{1}{s_2^2}-\frac{1}{s_4^2}\right)^2+c_3c_4\left(\frac{1}{s_3^2}-\frac{1}{s_4^2}\right)^2\right\}\\
&-\frac{\Delta t^8}{9600}\left\{c_1c_2\left(\frac{1}{s_1^2}-\frac{1}{s_2^2}\right)\left(\frac{1}{s_1^4}-\frac{1}{s_2^4}\right)\right.\\
&\quad+c_1c_3\left(\frac{1}{s_1^2}-\frac{1}{s_3^2}\right)\left(\frac{1}{s_1^4}-\frac{1}{s_3^4}\right)\\
&\quad+c_1c_4\left(\frac{1}{s_1^2}-\frac{1}{s_4^2}\right)\left(\frac{1}{s_1^4}-\frac{1}{s_4^4}\right)\\
&\quad+c_2c_3\left(\frac{1}{s_2^2}-\frac{1}{s_3^2}\right)\left(\frac{1}{s_2^4}-\frac{1}{s_3^4}\right)\\
&\quad+c_2c_4\left(\frac{1}{s_2^2}-\frac{1}{s_4^2}\right)\left(\frac{1}{s_2^4}-\frac{1}{s_4^4}\right)\\
&\quad+c_3c_4\left(\frac{1}{s_3^2}-\frac{1}{s_4^2}\right)\left(\frac{1}{s_3^4}-\frac{1}{s_4^4}\right)\\
&=O(\Delta t^{10})
\end{aligned}
\tag{76}
$$

となる。

(76) において，６次の項は

$$
\begin{aligned}
&c_1c_2\left(\frac{1}{s_1^2}-\frac{1}{s_2^2}\right)^2+c_1c_3\left(\frac{1}{s_1^2}-\frac{1}{s_3^2}\right)^2\\
&+c_1c_4\left(\frac{1}{s_1^2}-\frac{1}{s_4^2}\right)^2+c_2c_3\left(\frac{1}{s_2^2}-\frac{1}{s_3^2}\right)^2\\
&+c_2c_4\left(\frac{1}{s_2^2}-\frac{1}{s_4^2}\right)^2+c_3c_4\left(\frac{1}{s_3^2}-\frac{1}{s_4^2}\right)^2\\
&=c_1c_2\left(\frac{1}{s_1^4}+\frac{1}{s_2^4}\right)+c_1c_3\left(\frac{1}{s_1^4}+\frac{1}{s_3^4}\right)\\
&+c_1c_4\left(\frac{1}{s_1^4}+\frac{1}{s_4^4}\right)+c_2c_3\left(\frac{1}{s_2^4}+\frac{1}{s_3^4}\right)\\
&+c_2c_4\left(\frac{1}{s_2^4}+\frac{1}{s_4^4}\right)+c_3c_4\left(\frac{1}{s_3^4}+\frac{1}{s_4^4}\right)\\
&-\frac{1}{s_1^2}c_1\left(\frac{1}{s_1^2}c_1+\frac{1}{s_2^2}c_2+\frac{1}{s_3^2}c_3+\frac{1}{s_4^2}c_4\right)+\frac{1}{s_1^4}c_1^2\\
&-\frac{1}{s_2^2}c_2\left(\frac{1}{s_1^2}c_1+\frac{1}{s_2^2}c_2+\frac{1}{s_3^2}c_3+\frac{1}{s_4^2}c_4\right)+\frac{1}{s_2^4}c_2^2\\
&-\frac{1}{s_3^2}c_3\left(\frac{1}{s_1^2}c_1+\frac{1}{s_2^2}c_2+\frac{1}{s_3^2}c_3+\frac{1}{s_4^2}c_4\right)+\frac{1}{s_3^4}c_3^2\\
&-\frac{1}{s_4^2}c_4\left(\frac{1}{s_1^2}c_1+\frac{1}{s_2^2}c_2+\frac{1}{s_3^2}c_3+\frac{1}{s_4^2}c_4\right)+\frac{1}{s_4^4}c_4^2\\
&=c_1\left(\frac{1}{s_1^4}c_1+\frac{1}{s_2^4}c_2+\frac{1}{s_3^4}c_3+\frac{1}{s_4^4}c_4\right)\\
&+c_2\left(\frac{1}{s_1^4}c_1+\frac{1}{s_2^4}c_2+\frac{1}{s_3^4}c_3+\frac{1}{s_4^4}c_4\right)\\
&+c_3\left(\frac{1}{s_1^4}c_1+\frac{1}{s_2^4}c_2+\frac{1}{s_3^4}c_3+\frac{1}{s_4^4}c_4\right)\\
&+c_4\left(\frac{1}{s_1^4}c_1+\frac{1}{s_2^4}c_2+\frac{1}{s_3^4}c_3+\frac{1}{s_4^4}c_4\right)\\
&=0
\end{aligned}
\tag{77}
$$

より 0 となる。ここで４次と６次の条件を用いた。従って８次の精度内（誤差は１０次）で

$$
\begin{aligned}
&c_1c_2\left(\frac{1}{s_1^2}-\frac{1}{s_2^2}\right)\left(\frac{1}{s_1^4}-\frac{1}{s_2^4}\right)\\
&+c_1c_3\left(\frac{1}{s_1^2}-\frac{1}{s_3^2}\right)\left(\frac{1}{s_1^4}-\frac{1}{s_3^4}\right)\\
&+c_1c_4\left(\frac{1}{s_1^2}-\frac{1}{s_4^2}\right)\left(\frac{1}{s_1^4}-\frac{1}{s_4^4}\right)\\
&+c_2c_3\left(\frac{1}{s_2^2}-\frac{1}{s_3^2}\right)\left(\frac{1}{s_2^4}-\frac{1}{s_3^4}\right)\\
&+c_2c_4\left(\frac{1}{s_2^2}-\frac{1}{s_4^2}\right)\left(\frac{1}{s_2^4}-\frac{1}{s_4^4}\right)\\
&+c_3c_4\left(\frac{1}{s_3^2}-\frac{1}{s_4^2}\right)\left(\frac{1}{s_3^4}-\frac{1}{s_4^4}\right)\\
&=0
\end{aligned}
\tag{78}
$$

がエネルギー保存条件となる。(78) を変形すると

$$\begin{aligned}
&c_1c_2\left(\frac{1}{s_1^6}+\frac{1}{s_2^6}-\frac{1}{s_1^4s_2^2}-\frac{1}{s_1^2s_2^4}\right)\\
&+c_1c_3\left(\frac{1}{s_1^6}+\frac{1}{s_3^6}-\frac{1}{s_1^4s_3^2}-\frac{1}{s_1^2s_3^4}\right)\\
&+c_1c_4\left(\frac{1}{s_1^6}+\frac{1}{s_4^6}-\frac{1}{s_1^4s_4^2}-\frac{1}{s_1^2s_4^4}\right)\\
&+c_2c_3\left(\frac{1}{s_2^6}+\frac{1}{s_3^6}-\frac{1}{s_2^4s_3^2}-\frac{1}{s_2^2s_3^4}\right)\\
&+c_2c_4\left(\frac{1}{s_2^6}+\frac{1}{s_4^6}-\frac{1}{s_2^4s_4^2}-\frac{1}{s_2^2s_4^4}\right)\\
&+c_3c_4\left(\frac{1}{s_3^6}+\frac{1}{s_4^6}-\frac{1}{s_2^4s_4^2}-\frac{1}{s_3^2s_4^4}\right)\\
&=c_1\left(\frac{1}{s_1^6}c_1+\frac{1}{s_2^6}c_2+\frac{1}{s_3^6}c_3+\frac{1}{s_4^6}c_4\right)\\
&+c_2\left(\frac{1}{s_1^6}c_1+\frac{1}{s_2^6}c_2+\frac{1}{s_3^6}c_3+\frac{1}{s_4^6}c_4\right)\\
&+c_3\left(\frac{1}{s_1^6}c_1+\frac{1}{s_2^6}c_2+\frac{1}{s_3^6}c_3+\frac{1}{s_4^6}c_4\right)\\
&+c_4\left(\frac{1}{s_1^6}c_1+\frac{1}{s_2^6}c_2+\frac{1}{s_3^6}c_3+\frac{1}{s_4^6}c_4\right)\\
&-\frac{1}{s_1^2}c_1\left(\frac{1}{s_1^4}c_1+\frac{1}{s_2^4}c_2+\frac{1}{s_3^4}c_3+\frac{1}{s_4^4}c_4\right)\\
&-\frac{1}{s_2^2}c_2\left(\frac{1}{s_1^4}c_1+\frac{1}{s_2^4}c_2+\frac{1}{s_3^4}c_3+\frac{1}{s_4^4}c_4\right)\\
&-\frac{1}{s_3^2}c_3\left(\frac{1}{s_1^4}c_1+\frac{1}{s_2^4}c_2+\frac{1}{s_3^4}c_3+\frac{1}{s_4^4}c_4\right)\\
&-\frac{1}{s_4^2}c_4\left(\frac{1}{s_1^4}c_1+\frac{1}{s_2^4}c_2+\frac{1}{s_3^4}c_3+\frac{1}{s_4^4}c_4\right)\\
&=\frac{1}{s_1^6}c_1+\frac{1}{s_2^6}c_2+\frac{1}{s_3^6}c_3+\frac{1}{s_4^6}c_4=0 \qquad (79)
\end{aligned}$$

となる。(79) は８次の条件であり，エネルギーを保存するように c_4 を決めるとき，その主要項は数値積分の精度が８次になることを意味し，誤差は次の１０次の項に寄与する。即ち段数を (23) のように $s_j=j$ とするとき，Δt が十分小さければ c_4 は８次のときの値 $\frac{1024}{315}=3.2507936\cdots$ に近い値をとる。実際 $\Delta t=0.1$ のとき，エネルギー保存条件 (65) の解として，$c_4=3.2513091\cdots$ がある。このように $n=3$ のときの計算スキームはエネルギーの保存する８次の数値積分法となる。

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，エネルギーを保存する高次の数値積分法として，可変重みをもつ非対称な並列型合成法を提案した。この方法では，$(n+1)$ 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，エネルギー保存則が成り立つように調整する。調和振動子を例として取り上げ，$n=1$ の場合にはエネルギーを保存するように重みを調整することはできないが $n=2$ や $n=3$ では実際にそのようなことが可能であることを示した。また，この方法では数値積分の精度は $(2n+2)$ 次（$n=2,3$）であることが示された。一般のハミルトン系への応用は今後の課題である。

参考文献

[1] 石森勇次：非対称な並列型合成法による常微分方程式の高次数値積分, 富山県立大学紀要, Vol.20, (2010) 9-14.

[2] 石森勇次： 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, 富山県立大学紀要, Vol.18, (2008) 1-10.

Energy-Conservative Numerical Integrations for the Harmonic Oscillator Using A Non-Symmetric Parallel Composition Method with Variable Weights

Yuji ISHIMORI
Department of Liberal Arts and Sciences, Faculty of Engineering

Summary

We propose a non-symmetric parallel composition scheme with variable weights as a high-order energy-conservative numerical integration method for Hamiltonian systems and study its properties by applying it to the harmonic oscillator.

Key Words: Hamiltonian systems, harmonic oscillator, numerical integration, energy conservation, parallel composition method, variable weights, adaptive weighting, high-order scheme