

第2章 ハミルトン系に対する離散変数法

2.1 力学系の常微分方程式

自励系方程式 (autonomous system) の初期値問題

$$\boxed{\frac{dx}{dt} = f(x), \quad x(0) = u \in \mathbb{R}^d} \quad (2.1)$$

において, 初期値 $u \in \mathbb{R}^d$ を解の t での値 $x(t) \in \mathbb{R}^d$ に対応させる写像を S^t ($t = 0$ のときは, 恒等写像) .

写像の族 S^t ($t \in \mathbb{R}$) : 力学系 (dynamical system), 解作用素, あるいは作用素の半群 (operator semi-group)

微分方程式 $dx/dt = f(x)$ に対応する力学系の概念図は図 2.1

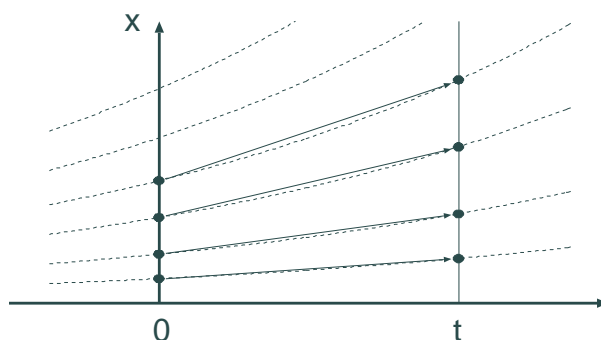


図 2.1: 力学系の写像 S^t

例題 2.1 2次元 $(q, p)^T$ の初期値問題

$$\frac{dq}{dt} = p, \quad \frac{dp}{dt} = -q, \quad q(0) = u, \quad p(0) = v \quad (u, v \in \mathbb{R}) \quad (2.2)$$

に対する写像 S^t は

$$S^t \left(\begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix} \right) = \begin{bmatrix} \cos t & \sin t \\ -\sin t & \cos t \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix} \quad (2.3)$$

力学系は原点のまわりの回転 ($t > 0$ のとき, 時計まわり) ■

定理 2.1 函数 $f(x)$ は \mathbb{R}^d 全体で定義され，大域的な Lipschitz 条件

$$\exists \gamma \geq 0; |f(x) - f(y)| \leq \gamma |x - y| \quad \forall x, y \in \mathbb{R}^d$$

が成り立つものとする．このとき，写像 $S^t : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$ はすべての実数 t に対して定義され，任意の $t_1, t_2 \in \mathbb{R}$ について（一般化された）指数法則 (exponential law)

$$\boxed{S^{t_2} S^{t_1} = S^{t_1+t_2}} \quad (2.4)$$

が成り立つ．■

以下 $|\cdot|$ は \mathbb{R}^d 上のユークリッド・ノルム

初期値問題 (2.1) の解 $x(t)$ を離散的な点 $t_n = nh$, ($n = 0, 1, \dots$) に限定して考えると，指数法則 (2.4) より，

$$x(t_1) = S^h(u), \quad x(t_2) = S^{2h}(u) = (S^h)^2(u), \quad \dots, \quad x(t_n) = (S^h)^n(u)$$

すなわち，解の t_n 上での値は

$$\begin{array}{ccccccc} S^h & & S^h & & S^h & & S^h & & \dots \\ u & \mapsto & x(t_1) & \mapsto & x(t_2) & \mapsto & x(t_3) & \mapsto & x(t_4) & \dots \end{array} \quad (2.5)$$

と，写像 S^h の反復により求められる．

一方，初期値問題 (2.1) に，例えばステップ幅 h を用いた Euler 法を適用すれば

$$\mathcal{E}^h(x) = x + hf(x) \quad (2.6)$$

により定義される写像 $\mathcal{E}^h : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$ を反復した

$$\begin{array}{ccccccc} \mathcal{E}^h & & \mathcal{E}^h & & \mathcal{E}^h & & \mathcal{E}^h & & \dots \\ u & \mapsto & x_1 & \mapsto & x_2 & \mapsto & x_3 & \mapsto & x_4 & \dots \end{array} \quad (2.7)$$

の系列が得られる．

(2.7) のように，写像 $F : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$ により定義される時系列を離散力学系 (discrete dynamical system)

微分方程式の力学系 S^t を連続力学系 (continuous dynamical system)

(2.7) は (2.5) を近似する力学系と考えられる．数値解法の特性を考える際には，離散変数法の与える力学系が，常微分方程式の力学系の特性を正しく反映したものになっているか，両者はどんな関係にあるかが重要

2.2 ハミルトン系

典型的力学系であるハミルトン系 (Hamiltonian system) の定義と基本的性質．

2.2.1 定義と簡単な例

\mathbb{R}^{2d} 値関数 $x(t) = [q(t)^T, p(t)^T]^T$ ($q(t), p(t) \in \mathbb{R}^d$) を未知変数とし, \mathbb{R}^{2d} 上で定義された C^2 級関数 $H(q, p)$ により

$$\boxed{\frac{dq_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \quad \frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \quad (i = 1, 2, \dots, d)} \quad (2.8)$$

と表される方程式をハミルトン系あるいは Hamilton 正準方程式 (canonical equations), 関数 $H(q, p)$ をハミルトニアン (Hamiltonian) と言う. 方程式 (2.8) を, しばしば

$$\frac{dx}{dt} = J \nabla H(x) \quad (2.9)$$

とも表現する. ここで J は

$$J = \begin{bmatrix} 0 & I_d \\ -I_d & 0 \end{bmatrix} \quad (I_d \text{ は } d \text{ 次単位行列}) \quad (2.10)$$

なる $(2d)$ 次正方行列, ∇H は関数 H の勾配

$$\begin{aligned} \nabla H &= [(\nabla_q H)^T, (\nabla_p H)^T]^T \\ \nabla_q H &= \left[\frac{\partial H}{\partial q_1}, \frac{\partial H}{\partial q_2}, \dots, \frac{\partial H}{\partial q_d} \right]^T, \quad \nabla_p H = \left[\frac{\partial H}{\partial p_1}, \frac{\partial H}{\partial p_2}, \dots, \frac{\partial H}{\partial p_d} \right]^T \end{aligned}$$

行列 J は

$$\boxed{J^T J = I_{2d}, \quad J J = -I_{2d}} \quad (2.11)$$

を満たす.

解析力学では, 変数 q が一般座標 (generalized coordinate), 変数 p が広義の運動量 (generalized momentum) に対応.

ハミルトン系の典型的な例 ポテンシャル場の質点系の運動を表わす方程式.

時刻 t における位置座標が関数 $q(t) (\in \mathbb{R}^d)$ で表され, 運動エネルギー T と位置エネルギー U が

$$T = \frac{1}{2} \dot{q}^T M(q) \dot{q}, \quad U = U(q) \quad (2.12)$$

と与えられるものとする. ここで, $\dot{q} = dq/dt$, $M(q)$ は正値対称行列.

$$p = M(q) \dot{q} \quad (2.13)$$

とおき, 全エネルギー $T + U$ を変数 q, p によるハミルトニアン

$$H(q, p) = \frac{1}{2} (M(q)^{-1} p)^T M(q) (M(q)^{-1} p) + U(q) = \frac{1}{2} p^T M(q)^{-1} p + U(q)$$

とすると, 運動方程式は (2.8) と与えられる.

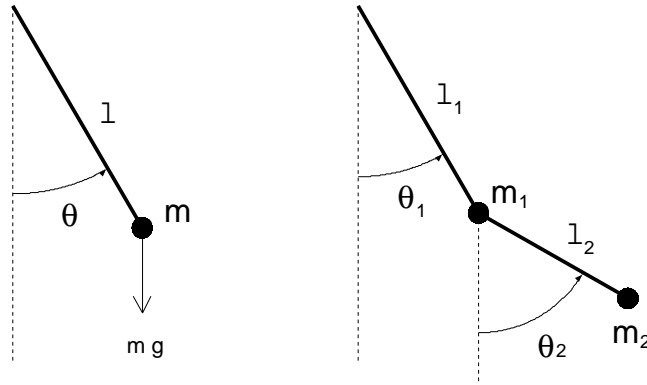


図 2.2: 単振り子と二重振り子

例題 2.2 (単振り子) 図 2.2 の左に示される単振り子の運動エネルギー，位置エネルギーは

$$T = \frac{1}{2} ml^2 \dot{\theta}^2, \quad U = -mgl \cos \theta \quad (2.14)$$

$q = \theta$ ， $p = ml^2 \dot{\theta}$ とおくと，ハミルトニアンは

$$H(q, p) = \frac{1}{2} ml^2 \left(\frac{p}{ml^2} \right)^2 - mgl \cos q = \frac{p^2}{2ml^2} - mgl \cos q$$

運動方程式は

$$\frac{dq}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{p}{ml^2}, \quad \frac{dp}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q} = -mgl \sin q \quad (2.15)$$

■

例題 2.3 (二重振り子) 図 2.2 の右で示される二重振り子 (double pendulum) の運動エネルギー，位置エネルギーはやや複雑で

$$\begin{aligned} T &= \frac{1}{2} m_1 l_1^2 \dot{\theta}_1^2 + \frac{1}{2} m_2 \left[l_1^2 \dot{\theta}_1^2 + l_2^2 \dot{\theta}_2^2 + 2l_1 l_2 \dot{\theta}_1 \dot{\theta}_2 \cos(\theta_1 - \theta_2) \right], \\ U &= -m_1 l_1 g \cos \theta_1 - m_2 g (l_1 \cos \theta_1 + l_2 \cos \theta_2) \end{aligned}$$

特に

$$M(\theta_1, \theta_2) = \begin{bmatrix} (m_1 + m_2)l_1^2 & m_2 l_1 l_2 \cos(\theta_1 - \theta_2) \\ m_2 l_1 l_2 \cos(\theta_1 - \theta_2) & m_2 l_2^2 \end{bmatrix} \quad (2.16)$$

とおくと，運動エネルギーは $T = (1/2)[\dot{\theta}_1, \dot{\theta}_2] M(\theta_1, \theta_2) [\dot{\theta}_1, \dot{\theta}_2]^T$ と表され，この行列を用いて変位・運動量を

$$\begin{bmatrix} q_1 \\ q_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \theta_1 \\ \theta_2 \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} p_1 \\ p_2 \end{bmatrix} = M(\theta_1, \theta_2) \begin{bmatrix} \dot{\theta}_1 \\ \dot{\theta}_2 \end{bmatrix}$$

とよくと，ハミルトニアンは

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2}[p_1, p_2]M(q_1, q_2)^{-1}[p_1, p_2]^T + U \\ &= \frac{m_2 l_2^2 p_1^2 + (m_1 + m_2) l_1^2 p_2^2 - 2m_2 l_1 l_2 p_1 p_2 \cos(q_1 - q_2)}{2m_2 l_1^2 l_2^2 [m_1 + m_2 - m_2 \cos^2(q_1 - q_2)]} \\ &\quad - m_1 l_1 g \cos q_1 - m_2 g (l_1 \cos q_1 + l_2 \cos q_2) \end{aligned}$$

運動方程式は

$$\begin{aligned} \frac{dq_1}{dt} &= \frac{\partial H}{\partial p_1} = \frac{F_1}{l_1^2 l_2 G}, & \frac{dq_2}{dt} &= \frac{\partial H}{\partial p_2} = \frac{F_2}{m_2 l_1 l_2^2 G} \\ \frac{dp_1}{dt} &= -\frac{\partial H}{\partial q_1} = -\frac{F_1 F_2 \sin(q_1 - q_2)}{l_1^2 l_2^2 G^2} - (m_1 + m_2) l_1 g \sin q_1, \\ \frac{dp_2}{dt} &= -\frac{\partial H}{\partial q_2} = \frac{F_1 F_2 \sin(q_1 - q_2)}{l_1^2 l_2^2 G^2} - m_2 l_2 g \sin q_2 \end{aligned}$$

ただし， F_1, F_2, G は，以下の式で与えられる．

$$\begin{aligned} F_1 &= l_2 p_1 - l_1 p_2 \cos(q_1 - q_2), \\ F_2 &= (m_1 l_1 + m_2 l_1) p_2 - m_2 l_2 p_1 \cos(q_1 - q_2), \\ G &= m_1 + m_2 - m_2 \cos^2(q_1 - q_2) \end{aligned}$$

■

ハミルトン系の保存性については

定理 2.2 初期条件 $q(0) = q_0, p(0) = p_0$ をみたすハミルトン系 (2.8) の解は，解が定義される任意の t について

$$H(q(t), p(t)) = H(q_0, p_0) \quad (2.17)$$

をみたす．■

2.2.2 シンプレクティック写像

ハミルトン系には定理 2.2 の他にも重要な保存性がある．

定義 2.1 $(2d)$ 次正方行列 M が

$$\boxed{M^T J M = J, \quad J = \begin{bmatrix} 0 & I_d \\ -I_d & 0 \end{bmatrix}} \quad (2.18)$$

をみたすとき， M を $(2d)$ 次の symplectic 行列 と言う． $(2d)$ 次 symplectic 行列全体の集合を $Sp(d, \mathbb{R})$ と表す．■

条件 (2.18) より, $Sp(d, \mathbb{R})$ は行列の積を乗法とする群となる. すなわち, $I_{2d} \in Sp(d, \mathbb{R})$ であり,

$$M_1, M_2 \in Sp(d, \mathbb{R}) \implies M_1 M_2 \in Sp(d, \mathbb{R}) \quad (2.19)$$

が成り立つ.

定義 2.2 \mathbb{R}^{2d} の領域 Ω で定義された C^1 級の写像

$$F : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^{2d}$$

が, symplectic 写像 であるとは, 任意の $x \in \Omega$ について, $DF(x) \in Sp(d, \mathbb{R})$ が成り立つことを言う. ここで, DF は, 写像 F のヤコビ行列

$$\left[\frac{\partial F_i}{\partial x_j} \right]_{1 \leq i, j \leq 2d}$$

を表す. ■

symplectic 行列の性質 (2.19) から, symplectic 写像の合成について次の定理がえられる.

定理 2.3 Ω_1, Ω_2 を \mathbb{R}^{2d} の領域とし, 写像 $F_1 : \Omega_1 \rightarrow \mathbb{R}^{2d}, F_2 : \Omega_2 \rightarrow \mathbb{R}^{2d}$ は, 各領域上で symplectic であり, さらに $F(\Omega_1) \subset \Omega_2$ とすると, 合成写像 $G(x) = F_2(F_1(x))$ ($x \in \Omega_1$) は, Ω_1 上の symplectic 写像となる. ■

実はハミルトン系の解写像は, 一般に symplectic となるという著しい性質がある.

定理 2.4 Ω を \mathbb{R}^{2d} の領域, $t_F > 0$ とし, ハミルトン系 (2.8) に関する解写像 $S^t(u)$ が, $u \in \Omega, 0 \leq t \leq t_F$ に対して定義されるものとする. そのとき, 任意の $0 \leq t \leq t_F$ に対して, S^t は Ω 上の symplectic 写像となる. ■

symplectic 写像の幾何学的意味 $Sp(1, \mathbb{R})$ は行列式の値が 1 である 2×2 行列の集合.

$$\text{写像 } F : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^2 \text{ が symplectic} \iff \det[DF(x)] = 1 \quad \forall x \in \mathbb{R}^2$$

\mathcal{D} を \mathbb{R}^2 の領域とすれば, 積分の変数変換の公式より

$$\int_{F(\mathcal{D})} dx = \int_{\mathcal{D}} \det[DF(x)] dx = \int_{\mathcal{D}} dx \quad (2.20)$$

\mathbb{R}^2 上の symplectic 写像とは, 面積を保つ写像に他ならない.

図 2.3 は “Arnold の猫 (Arnold’s cat)” (V. I. Arnold) と呼ばれる図形 (実線で示された猫の顔のような図形) を, ハミルトン系

$$\frac{dq}{dt} = p, \quad \frac{dp}{dt} = -\sin q \quad (2.21)$$

の解写像と, 散逸系

$$\frac{dq}{dt} = p, \quad \frac{dp}{dt} = -\sin q - 0.2p \quad (2.22)$$

の解写像で次々と写した像を平面上に図示．

散逸系 (2.22) の場合面積が縮小していくのに対して，ハミルトン系 (2.21) の場合は面積が一定に保たれる．

一般の symplectic 写像 $F : \mathbb{R}^{2d} \rightarrow \mathbb{R}^{2d}$ は， $d = 2$ のときの類推で， \mathbb{R}^{2d} 内の任意の曲面について，曲面を (q_i, p_i) 平面に射影した図形の面積の $i = 1, 2, \dots, d$ に関する和を一定に保つという幾何学的意味をもつ．すなわち， \mathbb{R}^{2d} 上の symplectic 写像とは， \mathbb{R}^2 における「面積」を，そのような形で \mathbb{R}^{2d} 空間に拡張した「計量」を保つ写像である．

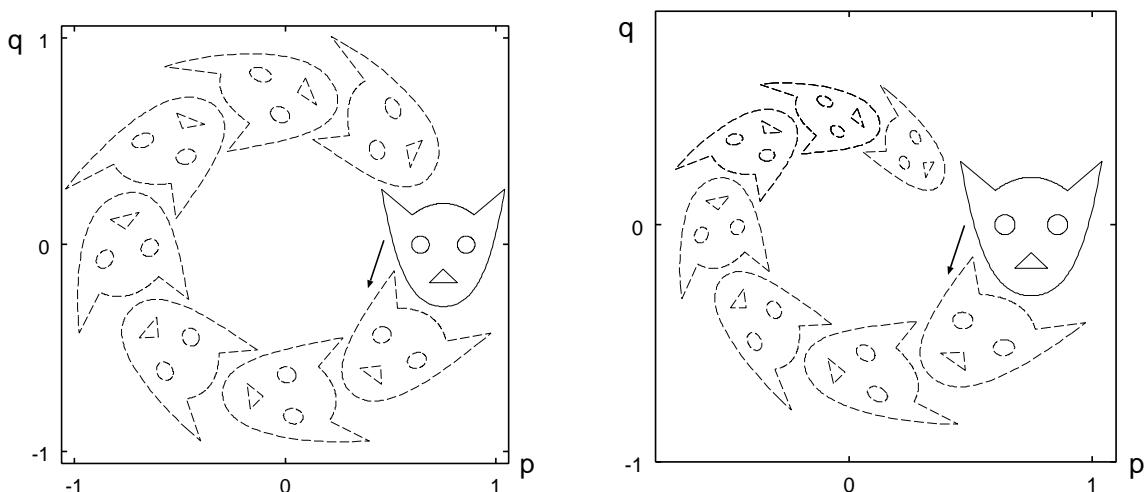


図 2.3: “Arnold の猫” の力学系 S^t による像．左：ハミルトン系，右：散逸系

2.3 Symplectic 離散変数法

力学系における symplectic という性質は，離散変数法においても再現できるであろうか．この観点で離散変数法を見直す．

2.3.1 Symplectic Euler 法

実数値関数 $q(t), p(t)$ に対して函数 $H(q, p) = (1/2)(p^2 + q^2)$ を Hamiltonian とするハミルトン系の方程式（単振動の方程式と呼ばれる）

$$\frac{dq}{dt} = p, \quad \frac{dp}{dt} = -q \quad (2.23)$$

に Euler 法を適用すると

$$\begin{cases} q_{n+1} = q_n + hp_n, \\ p_{n+1} = p_n - hq_n \end{cases} \quad (2.24)$$

の差分方程式が得られ，これをベクトル，行列を用いて表すと

$$\begin{bmatrix} q_{n+1} \\ p_{n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & h \\ -h & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} q_n \\ p_n \end{bmatrix} \quad (2.25)$$

右辺の行列の行列式は $1 + h^2$ であるから，(2.25) によって (q_n, p_n) 平面上の図形を (q_{n+1}, p_{n+1}) 平面上に写すと，面積は必ず $(1 + h^2)$ 倍に) 拡大．

後退 Euler 法を適用すると

$$\begin{cases} q_{n+1} = q_n + hp_{n+1}, \\ p_{n+1} = p_n - hq_{n+1} \end{cases} \quad (2.26)$$

すなわち

$$\begin{bmatrix} q_{n+1} \\ p_{n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & -h \\ h & 1 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} q_n \\ p_n \end{bmatrix} \quad (2.27)$$

となり， (q_n, p_n) 平面上から (q_{n+1}, p_{n+1}) 平面上への写像として，面積を必ず $(1/(1 + h^2))$ に) 縮小．

Euler 法 (2.24) の第 2 式で q_n だけを q_{n+1} で置き換えた

$$\begin{cases} q_{n+1} = q_n + hp_n, \\ p_{n+1} = p_n - hq_{n+1} \end{cases} \quad (2.28)$$

では，第 1 式を第 2 式に代入すれば

$$\begin{bmatrix} q_{n+1} \\ p_{n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & h \\ -h & 1 - h^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} q_n \\ p_n \end{bmatrix} \quad (2.29)$$

右辺の行列の行列式の値が 1 となることから，(2.29) は面積を不変に保つ写像，つまり symplectic 写像．(2.28) を symplectic Euler 法 という．

このように，ハミルトン系に適用して symplectic 写像を与える離散変数法を symplectic 数値解法 (symplectic numerical method) と言う．

symplectic Euler 法は，一般のハミルトン系 (2.8) に対して

$$\begin{cases} q_{n+1} = q_n + h\nabla_p H(q_{n+1}, p_n), \\ p_{n+1} = p_n - h\nabla_q H(q_{n+1}, p_n) \end{cases} \quad (2.30)$$

と定義される 1 段階法．

スキーム (2.30) は q_{n+1} が右辺にも含まれる陰的公式で， q_{n+1} を計算するために非線形方程式を解く必要がある．

Hamiltonian が

$$\boxed{H(q, p) = T(p) + U(q) \quad (q, p \in \mathbb{R}^d)} \quad (2.31)$$

と与えられるハミルトン系

$$\frac{dq}{dt} = \nabla_p T(p), \quad \frac{dp}{dt} = -\nabla_q U(q) \quad (2.32)$$

を, 可分な (separable) ハミルトン系と言う. このとき symplectic Euler 法 (2.30) は

$$\begin{cases} q_{n+1} = q_n + h\nabla_p T(p_n), \\ p_{n+1} = p_n - h\nabla_q U(q_{n+1}) \end{cases} \quad (2.33)$$

となり, q_{n+1}, p_{n+1} の順に代入計算だけで近似解が求められる.

可分なハミルトン系は, 単振子の方程式に現われたように, 応用上よく登場する. 以下, しばらく可分なハミルトン系 (2.32) を考える.

可分なハミルトン系で, 函数 T, U は $C^2(\mathbb{R}^d)$ 級とし, h に依存する写像 $S_Q^h, S_P^h : \mathbb{R}^{2d} \rightarrow \mathbb{R}^{2d}$ を

$$S_Q^h : \begin{bmatrix} q \\ p \end{bmatrix} \mapsto \begin{bmatrix} q + h\nabla_p T(p) \\ p \end{bmatrix}, \quad (2.34)$$

$$S_P^h : \begin{bmatrix} q \\ p \end{bmatrix} \mapsto \begin{bmatrix} q \\ p - h\nabla_q U(q) \end{bmatrix} \quad (2.35)$$

と定義し, $x_n = [q_n^T, p_n^T]^T$ とおくと合成写像 $S_E^h = S_P^h S_Q^h$ を用いて, (2.33) は

$$\boxed{x_{n+1} = S_E^h(x_n)} \quad (2.36)$$

と表現できる.

定理 2.5 symplectic Euler 法 (2.33) が定める写像 (2.36) は, \mathbb{R}^{2d} 上の symplectic 写像となる. ■

注意 2.1 一般のハミルトン系に対する symplectic Euler 法 (2.30) も写像としてうまく定義されるならば, symplectic 写像となる. ■

定理 2.6 symplectic Euler 法は, T, U が適切な条件を満たすならば, 1 次収束である. ■

2.3.2 写像の合成に基づく高精度化

より高い次数をもつ symplectic 離散変数法を, symplectic Euler 法の合成写像表現 (2.36) を手がかりに追求する.

自然数 s に対して $(2s)$ 個の実数

$$\boxed{b_1, b_2, \dots, b_s, \widehat{b}_1, \widehat{b}_2, \dots, \widehat{b}_s} \quad (2.37)$$

を定め, 式 (2.34), (2.35) で定義される写像を用い, 各 i に対してステップ幅 h の b_i あ
るいは \widehat{b}_i 倍を h に代え, $\mathcal{S}_i: \mathbb{R}^{2d} \rightarrow \mathbb{R}^{2d}$ を

$$\mathcal{S}_i = S_P^{\widehat{b}_i h} S_Q^{b_i h} \quad (2.38)$$

と定義する. 写像 S_E^h の定理 2.5 と同様, \mathcal{S}_i も symplectic 写像となる.

そこで \mathcal{S}_i を“素子”とし, $x_n = [q_n^T, p_n^T]^T$ から $x_{n+1} = [q_{n+1}^T, p_{n+1}^T]^T$ へのスキームを

$$x_{n+1} = S^h(x_n) \quad (S^h = S_s \cdots S_2 S_1) \quad (2.39)$$

と与える. ここで, $S_s \cdots S_2 S_1$ は, 写像 S_1, S_2, \dots, S_s の合成写像.

定理 2.3 により, (2.39) の S^h は symplectic 写像となるから, 係数パラメータ b_i, \widehat{b}_i ($1 \leq i \leq s$) をうまく定めて, 局所誤差

$$\boxed{q(t_0 + h) - q_1, \quad p(t_0 + h) - p_1} \quad (2.40)$$

が $\mathcal{O}(h^{p+1})$ となるようにすれば, p 次の symplectic 離散変数法が得られる.

$s = 2$ の場合: (2.39) は, 中間変数 Q, P ($\in \mathbb{R}^d$) を導入することにより,

$$\begin{cases} Q = q_n + h b_1 f(p_n), & P = p_n + h \widehat{b}_1 g(Q), \\ q_{n+1} = Q + h b_2 f(P), & p_{n+1} = P + h \widehat{b}_2 g(q_{n+1}) \end{cases} \quad (2.41)$$

ここで $f(p) = \nabla_p T(p)$, $g(q) = -\nabla_q U(q)$ とおいている. これより, h のべき級数への展開は

$$\begin{aligned} q_1 &= q_0 + h(b_1 + b_2)f(p_0) + h^2(\widehat{b}_1 b_2)Df(p_0)g(q_0) + \mathcal{O}(h^3), \\ p_1 &= p_0 + h(\widehat{b}_1 + \widehat{b}_2)g(q_0) + h^2[\widehat{b}_1 b_1 + \widehat{b}_2(b_1 + b_2)]Dg(q_0)f(p_0) + \mathcal{O}(h^3) \end{aligned}$$

一方厳密解は

$$\frac{d^2 q}{dt^2} = Df(p) \frac{dp}{dt} = Df(p)g(q), \quad \frac{d^2 p}{dt^2} = Dg(q) \frac{dq}{dt} = Dg(q)f(p)$$

を考慮して

$$\begin{cases} q(t_0 + h) = q_0 + hf(p_0) + \frac{h^2}{2}Df(p_0)g(q_0) + \mathcal{O}(h^3), \\ p(t_0 + h) = p_0 + hg(q_0) + \frac{h^2}{2}Dg(q_0)f(p_0) + \mathcal{O}(h^3) \end{cases} \quad (2.42)$$

とテイラー展開されるので, 係数パラメータが

$$b_1 + b_2 = 1, \quad \widehat{b}_1 + \widehat{b}_2 = 1, \quad \widehat{b}_1 b_2 = \frac{1}{2}, \quad (2.43)$$

$$\widehat{b}_1 b_1 + \widehat{b}_2(b_1 + b_2) = \frac{1}{2} \quad (2.44)$$

をみたすならば, 局所誤差が $\mathcal{O}(h^3)$.

$b_2 \neq 0$ を任意定数として, 2 次公式の係数パラメータは

$$b_1 = 1 - b_2, \quad \widehat{b}_1 = \frac{1}{2b_2}, \quad \widehat{b}_2 = 1 - \frac{1}{2b_2} \quad (2.45)$$

例えば, $b_2 = 1$ のときは, $b_1 = 0, \widehat{b}_1 = \widehat{b}_2 = 1/2$, さらに $P = p_{n+1/2}$ とおけば (2.41) は

$$\begin{cases} p_{n+1/2} = p_n + \frac{h}{2}g(q_n), \\ q_{n+1} = q_n + hf(p_{n+1/2}), \\ p_{n+1} = p_{n+1/2} + \frac{h}{2}g(q_{n+1}) \end{cases} \quad (2.46)$$

に帰着. このスキームは, 関連する二階微分方程式の解法にちなんで, Störmer-Verlet の方法と呼ばれている.

$s = 3$ の場合: 3 次の公式として Ruth の公式

$$\begin{array}{|l|} \hline \begin{array}{ccc} b_i : & 7/24 & 3/4 & -1/24 \\ \widehat{b}_i : & 2/3 & -2/3 & 1 \end{array} \\ \hline \end{array} \quad (2.47)$$

$s = 6$ の場合: 4 次の公式として Sanz-Serna の公式

$$\begin{array}{|l|} \hline \begin{array}{cccccc} b_i : & 7/48 & 3/8 & -1/48 & -1/48 & 3/8 & 7/48 \\ \widehat{b}_i : & 1/3 & -1/3 & 1 & -1/3 & 1/3 & 0 \end{array} \\ \hline \end{array} \quad (2.48)$$

Sanz-Serna 公式 (2.48) の構成には, “共役な離散変数法” の概念が必要.

一般の自励系の方程式

$$\frac{dx}{dt} = f(x) \quad (2.49)$$

の解 $x(t)$ に対して $y(t) = x(-t)$ とおくと, $y'(t) = -x(t)$ の関係から, $y(t)$ は

$$\frac{dy}{dt} = -f(y) \quad (2.50)$$

をみtas. したがって, (2.49) の定める力学系 S^t と (2.50) の定める力学系 S_*^t の間では $S^t = S_*^{-t}$ の関係が成立. この関係に着目し, 方程式 (2.49) に対する離散変数法を方程式 (2.50) に適用し, 「時間を逆転」することにより得られる方法を, 元の離散変数法の共役 (conjugate) という. 一般には, 共役な方法は元の方法とは異なる.

例 symplectic Euler 法 (2.33) で, 函数 f, g を導入し, それらを $-f, -g$ でおきかえ, q_{n+1} と q_n, p_{n+1} と p_n をそれぞれ入れ替えた

$$\begin{cases} q_n = q_{n+1} - hf(p_{n+1}), \\ p_n = p_{n+1} - hg(q_n) \end{cases}$$

が共役を与え

$$\begin{cases} p_{n+1} = p_n + hg(q_n), \\ q_{n+1} = q_n + hf(p_{n+1}) \end{cases} \quad (2.51)$$

と書き直されることから，変数 p, q の計算の順序を逆にすれば，symplectic Euler 法 (2.33) と同様，可分なハミルトン系 (2.32) の数値解を代入計算だけで求めることができる．また，1 次であることが確認できる．

共役な離散変数法と元の方法とを「合成」すると，精度を引き上げることが可能．

例 公式 (2.51) で h を $h/2$ に置きかえ $p(t_n + h/2), q(t_n + h/2)$ の近似値 $p_{n+1/2}, q_{n+1/2}$ を求め，次に symplectic Euler 法 (2.33) をやはりステップ幅を半分にして適用して， $p_{n+1/2}, q_{n+1/2}$ から q_{n+1}, p_{n+1} を計算する．まとめると

$$\begin{cases} p_{n+1/2} = p_n + \frac{h}{2} g(q_n), \\ q_{n+1/2} = q_n + \frac{h}{2} f(p_{n+1/2}), \\ q_{n+1} = q_{n+1/2} + \frac{h}{2} f(p_{n+1/2}), \\ p_{n+1} = p_{n+1/2} + \frac{h}{2} g(q_{n+1}) \end{cases}$$

第 2 式と第 3 式をひとつにまとめると，Störmer-Verlet の方法 (2.46) と一致し，2 次である．

一般の離散 symplectic 写像 (2.39) の共役は

$$x_{n+1} = S_*^h(x_n) \quad \left(S_*^h = T_1 T_2 \cdots T_s, \quad T_i = S_Q^{b_i h} S_P^{\widehat{b}_i h} \right) \quad (2.52)$$

で与えられることが知られている．さらに，共役は元の離散変数法と同じ次数をもち，元の方法とその共役を合成して得られる解法（順序は逆でもよいが，ともにステップ幅 $h/2$ にする）は，必ず偶数次数となることが知られている．したがって，奇数次の場合には，元の方法とその共役を組み合わせることにより，次数が 1 次高い解法が得られる．Sanz-Serna の方法は，Ruth の方法とその共役を合成して，整頓したものである．

2.3.3 Gauss-Legendre 法

以上は，陽的離散変数法に限った場合であるが，陰的方法に拡張すると，より高精度の symplectic 法を系統的に導くことができる．

一般の微分方程式 $dx/dt = f(t, x)$ に対して，(1.17) を拡張したスキーム

$$\begin{cases} X_i = x_n + h \sum_{j=1}^s a_{ij} f(t_n + c_j h, X_j), \\ x_{n+1} = x_n + h \sum_{i=1}^s b_i f(t_n + c_i h, X_i) \end{cases} \quad (2.53)$$

から定まる離散変数法が陰的 Runge-Kutta 法 (implicit Runge-Kutta method, IRK method) .

x_n は $x(t_n)$ の近似値, X_i ($1 \leq i \leq s$) は x_n から x_{n+1} を算出するための中間変数 . 通常の Runge-Kutta 法の場合, 代入計算だけで中間変数が求められるのに対して, 陰的 Runge-Kutta 法では, X_i を未知変数とする非線形方程式を解く必要 .

IRK でも整数 $s (\geq 1)$ を段数, a_{ij} ($1 \leq i, j \leq s$), b_i, c_i ($1 \leq i \leq s$) を係数パラメータと呼び,

$$\begin{array}{c|cccc} c_1 & a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1s} \\ c_2 & a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2s} \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ c_s & a_{s1} & a_{s2} & \cdots & a_{ss} \\ \hline & b_1 & b_2 & \cdots & b_s \end{array} \quad (2.54)$$

のような配列 を用いて表す .

陰的 Runge-Kutta 法を (可分とは限らない一般の) ハミルトン系 (2.8) に適用すると

$$\begin{cases} X_i &= x + h \sum_{j=1}^s a_{ij} J \nabla H(X_j), \\ \mathcal{R}^h(x) &= x + h \sum_{i=1}^s b_i J \nabla H(X_i) \end{cases} \quad (2.55)$$

で定義される写像 \mathcal{R}^h による離散力学系が得られる . この \mathcal{R}^h は, 以下の条件のもとで, symplectic 写像となる .

定理 2.7 式 (2.55) は \mathbb{R}^{2d} の領域 Ω から \mathbb{R}^{2d} への写像 \mathcal{R}^h を定めるものとする . そのとき, 係数パラメータが

$$\boxed{m_{ij} \equiv b_i a_{ij} + b_j a_{ji} - b_i b_j = 0 \quad (1 \leq i, j \leq s)} \quad (2.56)$$

をみたすならば, \mathcal{R}^h は Ω 上の symplectic 写像となる . ■

注意 2.2 比較的緩やかな仮定 (多くの陰的 Runge-Kutta 公式がその仮定をみたす) のもとで, 条件 (2.56) は, Runge-Kutta 法が symplectic 解法となるための必要条件でもあることが証明されている . ■

条件 (2.56) をみたす公式の実例とその特性

s 次 Legendre 多項式

$$P_s(\xi) = \frac{1}{2^s s!} \frac{d^s}{d\xi^s} (\xi^2 - 1)^s \quad (2.57)$$

の根を $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_s$ ($-1 < \xi_1 < \xi_2 < \dots < \xi_s < 1$) とし, その分布を $(0, 1)$ に移動した

$$c_i = \frac{1 + \xi_i}{2} \quad (1 \leq i \leq s) \quad (2.58)$$

を IRK のパラメータ配列 (2.54) に現われる $c_i, a_{ij} (1 \leq i, j \leq s), b_i (1 \leq i \leq s)$ を

$$a_{ij} = \int_0^{c_i} \ell_j(\sigma) d\sigma, \quad b_i = \int_0^1 \ell_i(\sigma) d\sigma \quad (2.59)$$

により定義する．ここで， $\ell_i(\sigma)$ は c_1, c_2, \dots, c_s を補間点とする Lagrange 補間 (多項式補間) の基本多項式

$$\ell_i(\sigma) = \prod_{j=1, j \neq i}^s \frac{\sigma - c_j}{c_j - c_i} \quad (2.60)$$

すなわち，

$$\ell_i(c_j) = \begin{cases} 1 & (j = i) \\ 0 & (j \neq i) \end{cases} \quad (2.61)$$

の関係で定まる $s - 1$ 次多項式．

係数パラメータ (2.59) から定まる (s 段) 陰的 Runge-Kutta 法は，Gauss-Legendre 法 (Gauss-Legendre method) と呼ばれる．これは， b_i, c_i が，積分区間 $0 \leq \sigma \leq 1$ の場合の Gauss 型の数値積分公式，すなわち Gauss-Legendre 公式の重みと分点を与えることに由来する．実際，

$$\sum_{i=1}^s b_i f(c_i) \approx \int_0^1 f(\sigma) d\sigma \quad (2.62)$$

は， $f(\sigma)$ が $2s - 1$ 次以下の多項式の場合には，正確な積分値を与える積分公式．

段数 $s = 1, 2, 3$ に対する公式は以下の表で与えられる．特に， $s = 1$ の公式は，陰的中点則 (implicit midpoint rule) とも呼ばれる．

$$\begin{array}{c|c} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \hline \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \hline & 1 \end{array} \quad (2.63)$$

$$\begin{array}{c|cc} \frac{3 - \sqrt{3}}{6} & \frac{1}{4} & \frac{3 - 2\sqrt{3}}{12} \\ \frac{3 + \sqrt{3}}{6} & \frac{3 + 2\sqrt{3}}{12} & \frac{1}{4} \\ \hline & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{array} \quad (2.64)$$

$$\begin{array}{c|ccc} \frac{5 - \sqrt{15}}{10} & \frac{5}{36} & \frac{80 - 24\sqrt{15}}{360} & \frac{50 - 12\sqrt{15}}{360} \\ \frac{1}{2} & \frac{50 + 15\sqrt{15}}{360} & \frac{2}{9} & \frac{50 - 15\sqrt{15}}{360} \\ \frac{5 + \sqrt{15}}{10} & \frac{50 + 12\sqrt{15}}{360} & \frac{80 + 24\sqrt{15}}{360} & \frac{5}{36} \\ \hline & \frac{5}{18} & \frac{4}{9} & \frac{5}{18} \end{array} \quad (2.65)$$

Gauss-Legendre 法の特徴

定理 2.8 任意の整数 $s \geq 1$ に対して, s 段 Gauss-Legendre 法の次数は $2s$ である. ■

定理 2.9 任意の整数 $s \geq 1$ に対して, s 段 Gauss-Legendre 法は条件 (2.56) をみたす. すなわち, symplectic 数値解法である. ■

こうして, 理論上は, いくらでも高い次数の symplectic 解法が得られる.

定理 2.10 任意の整数 $s \geq 1$ に対して, s 段 Gauss-Legendre 法の安定性領域は左半平面 $\Re z < 0$ と一致する. すなわち, A 安定 (A -stable) である. ■

2.4 数値計算例

例題 1.3 で取り上げた二体問題の方程式は, 可分なハミルトン系である. 実際

$$H(q, p) = \frac{1}{2} (p_1^2 + p_2^2) - \frac{1}{r} \quad \left(r = \sqrt{q_1^2 + q_2^2} \right) \quad (2.66)$$

とすれば, これを Hamiltonian として 正準方程式は (1.46) に一致する. 今度は初期条件を

$$q_1(0) = 1, \quad q_2(0) = 0, \quad p_1(0) = 0, \quad p_2(0) = 1 \quad (2.67)$$

と与えると, 厳密解は

$$\begin{cases} q_1(t) = \cos t, & q_2(t) = \sin t, \\ p_1(t) = -\sin t, & p_2(t) = \cos t \end{cases}$$

であり, 軌道は円軌道となる.

初期値問題 (1.46), (2.67) を例題として, symplectic 解法の誤差を測定した結果が表 2.1. 積分区間: $0 \leq t \leq 10$, N 等分して得られるステップ点 $t_n = nh$ ($h = 1/N$) 上で厳密解

$$x(t_n) = [q_1(t_n), q_2(t_n), p_1(t_n), p_2(t_n)]^T$$

に対する数値解 x_n の最大誤差

$$\varepsilon_N = \max_{1 \leq n \leq N} |x(t_n) - x_n|_\infty$$

とし, $-\log_2 \varepsilon_N$ を表示.

“陽的 1 次法”: symplectic Euler, “陽的 2 次法”: Störmer-Verlet (2.46),

“陽的 3 次法”: Ruth (2.47), “陽的 4 次法”: Sanz-Serna (2.48),

“GL 2 次法”: 1 段 2 次 Gauss-Legendre (陰的 midpoint) (2.63),

“GL 4 次法”: 2 段 4 次 Gauss-Legendre (2.64), “RK 法”: 古典的 Runge-Kutta (symplectic ではない, 比較のため)

表 2.1 より, いずれの解法についても, 分割数 N を 2 倍にすると誤差が $1/2^p$ 程度 (p は解法の次数) に減少することがわかる.

表 2.1: symplectic 離散変数法による近似解の有効桁数

N	100	200	400	800	1600	3200
陽的 1 次法	1.68	2.94	4.09	5.17	6.21	7.24
陽的 2 次法	4.32	6.31	8.31	10.31	12.31	14.31
陽的 3 次法	12.58	15.64	18.67	21.68	24.69	27.69
陽的 4 次法	20.33	24.33	28.34	32.34	36.32	40.22
GL 2 次法	3.31	5.33	7.33	9.33	11.33	13.33
GL 4 次法	15.08	19.08	23.08	27.08	31.08	35.08
RK 法	13.95	18.32	22.55	26.68	30.75	34.79

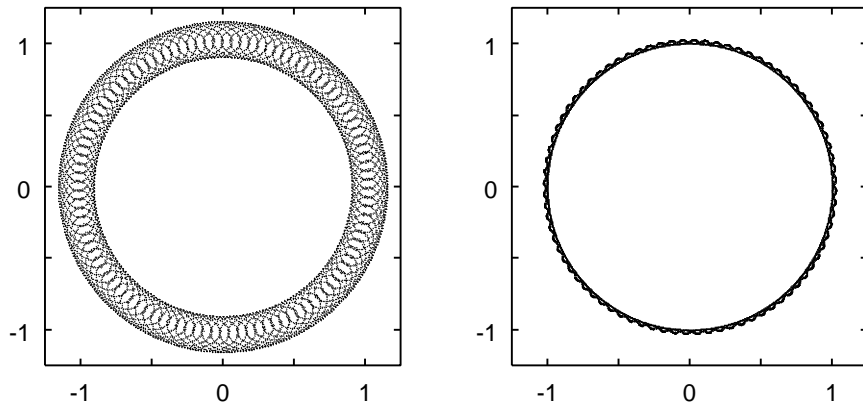


図 2.4: symplectic Euler 法 (左), 陽的 2 次法 (右) の数値解軌道

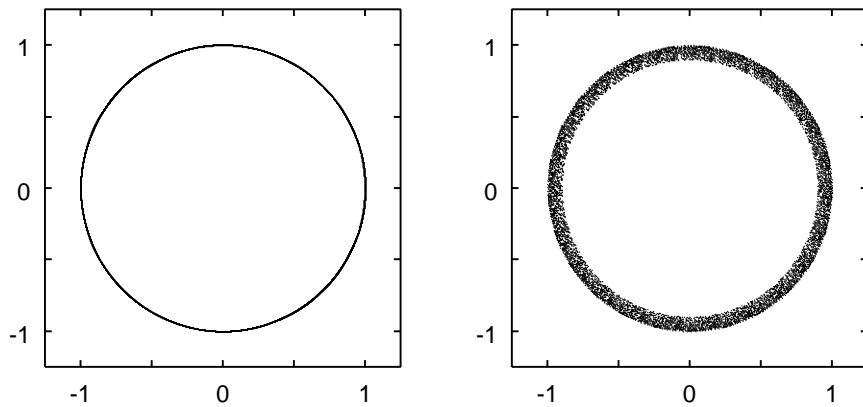


図 2.5: Ruth 法 (左), 古典的 Runge-Kutta 法 (右) の数値解軌道

長時間にわたる計算を行なうと，symplectic 離散変数法の特徴は一層顕著．ステップ幅 $h = 0.25$ で，10000 ステップ ($0 \leq t \leq 2500$) の近似値を求め，それを q_1 - q_2 平面上（縦軸が q_1 ，横軸が q_2 ）に軌道をプロットしたのが図 2.4, 2.5．

陽的 3 次法 (Ruth 法) では，ほぼ円軌道が得られているのに対して，古典的 Runge-Kutta 法では，円の半径がわずかずつながら減少．図には示さないが，陽的 4 次法 (Sanz-Serna 法)，2 段 4 次 Gauss-Legendre 法の場合も軌道はほぼ円．一方，1 次，2 次の symplectic 解法の場合，数値解は（円軌道とは異なる）周期的で規則的な軌道を描いている．こうした傾向は，比較的大きなステップ幅で symplectic 解法を用いた際には，しばしば観察される．