

ハミルトン力学系のためのシンプレクティック数値積分法*

吉田春夫 (国立天文台, 総研大)

Abstract

ハミルトン系の時間発展の特性であるシンプレクティック性を厳密に保存する数値解法をシンプレクティック数値積分法という。この積分法を使うとエネルギーの誤差が単調には増大せず、系の長時間の挙動を問題にする時の数値解法として都合が良い。その数理的諸性質について述べる。

1 はじめに

1.1 微分方程式の数値解法

ベクトル変数 $z = (z_1, z_2, \dots, z_n)$ に対する微分方程式系

$$\frac{dz}{dt} = f(z) \quad (1)$$

が与えられた時にその解 (近似解) を数値的に求めることを考えよう。時刻 $t=0$ での初期値 z に対して十分小さな時間 τ 後の近似解 z' を与える写像が $z' = \psi(z, \tau)$, の形で求まれば, これを繰り返すことによつて $t = \tau, 2\tau, 3\tau, \dots, n\tau$ での近似解が次々と求まっていく。ここで τ は通常ステップサイズ (刻み幅) と呼ばれる小さな数である。考え得る最も簡単で原始的な方法は方程式 (1) の微分 dz/dt を差分 $(z' - z)/\tau$ で置き換えて得られる

$$z' = \psi(z, \tau) = z + \tau f(z) \quad (2)$$

なる写像を用いるものでオイラー法と呼ばれる。このオイラー法は真の解のテイラー展開

$$\begin{aligned} z' &= z + \tau \left(\frac{dz}{dt} \right) + \frac{\tau^2}{2} \left(\frac{d^2 z}{dt^2} \right) + \frac{\tau^3}{6} \left(\frac{d^3 z}{dt^3} \right) + \dots \\ &= z + \tau f(z) + \frac{\tau^2}{2} f'(z) f(z) + \frac{\tau^3}{6} (f''(z) f(z) + f'(z)^2) f(z) + \dots \end{aligned} \quad (3)$$

の τ の 1 次まで一致するので, 1 次の解法であるという。もし写像 $z' = \psi(z, \tau)$ が真の解のテイラー展開 (3) の τ^n の次数まで一致すれば, それは n 次の数値積分公式 (数値解法, 数値積分スキーム) と呼ばれる。実際, 解のテイラー展開の n 次の項までを直接計算することで常に n 次の数値解法が得られるが (テイラー展開法), 関数 $f(z)$ の高次の微分係数を書き下し, それをプログラムすることは困難なことが多い。よく使われるルンゲ・クッタ法は次々と

$$k_1 = \tau f(z), \quad k_2 = \tau f(z + k_1/2), \quad k_3 = \tau f(z + k_2/2), \quad k_4 = \tau f(z + k_3) \quad (4)$$

で定義されるベクトル k_1, k_2, k_3, k_4 を計算して, 最後に加重平均

$$z' = z + \frac{1}{6} (k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4) \quad (5)$$

をとることによって 1 ステップとするものである。(5) 式の右辺を τ で展開すれば解のテイラー展開 (3) の τ の 4 次まで一致するので 4 次の数値解法であると言える。そして高次の微分係数の計算が不必要であるという利点がある。

*本稿は最初 1993 年中に朝倉書店から出版される予定だった単行本 (論文集) のために準備したものである。そのために簡単に追加, 更新できる参考文献以外にはその後の進展については触れられていない。

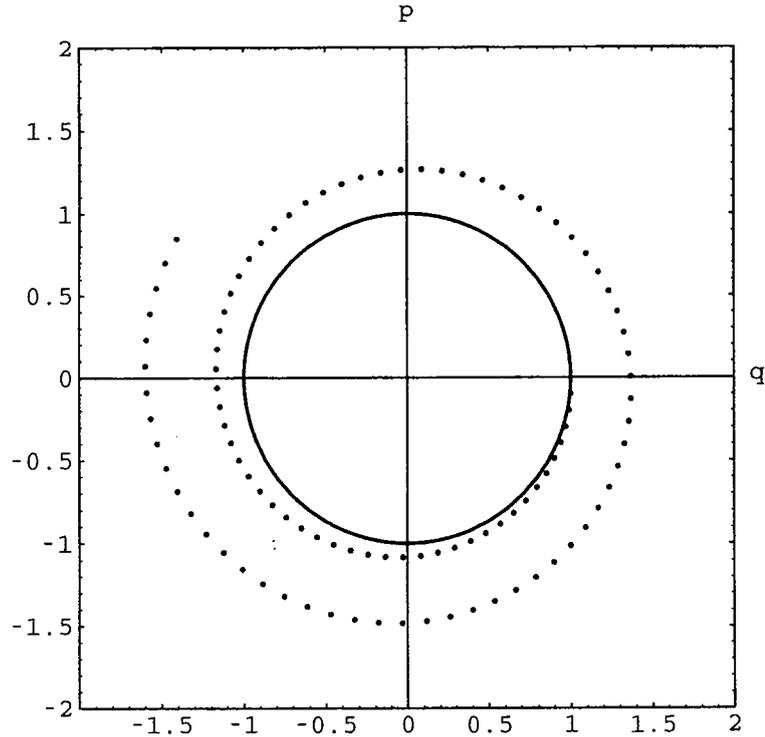


図 1: 調和振動子の方程式の真の解曲線 (単位円) とオイラー法による近似解 ($\tau = 0.1$)

1.2 調和振動子の例

これらオイラー法, ルンゲ・クッタ法などの汎用数値積分法を保存力学系であるハミルトン系に適用すると, 数値解法自身が原因となって発生する見かけの励起, 減衰が起きる. 例としてハミルトニアン

$$H = (1/2)(p^2 + q^2) \quad (6)$$

で記述される一次元の調和振動子を考えよう. 運動方程式

$$\frac{dq}{dt} = p, \quad \frac{dp}{dt} = -q \quad (7)$$

の厳密解は明らかに

$$\begin{pmatrix} q(\tau) \\ p(\tau) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \tau & \sin \tau \\ -\sin \tau & \cos \tau \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q(0) \\ p(0) \end{pmatrix} \quad (8)$$

である (角度 τ の回転). 一方, オイラー法 (2) は写像

$$q' = q + \tau p, \quad p' = p - \tau q \quad (9)$$

すなわち

$$\begin{pmatrix} q' \\ p' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & \tau \\ -\tau & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} \quad (10)$$

を与えるがこれは上の厳密解 (8) を τ の 1 次まで近似したものに他ならない. 図 1 は $t = 0$ で $(q, p) = (1, 0)$ なる初期値を与えた時の真の解曲線 (単位円) とオイラー法で生成される近似解の点列を描いたものである. このオイラー法によれば各ステップごとに本来保存されるべきエネルギーの値は $(1 + \tau^2)$ 倍される, すなわち

$$(p'^2 + q'^2) = (1 + \tau^2)(p^2 + q^2) \quad (11)$$

なることがわかり, 結果としてエネルギー値は無限に増大する (見かけの励起). 一方, 4 次のルンゲ・クッタ法 (5) は写像

$$\begin{pmatrix} q' \\ p' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 - \tau^2/2 + \tau^4/24 & \tau - \tau^3/6 \\ -\tau + \tau^3/6 & 1 - \tau^2/2 + \tau^4/24 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} \quad (12)$$

を与え、今度は逆にエネルギー値の単調な減少

$$(p'^2 + q'^2) = (1 - \frac{1}{72}\tau^6 + \dots)(p^2 + q^2) \quad (13)$$

が起きる（見かけの減衰）。このような数値計算法が原因となって起こる見かけの励起、減衰は長時間にわたる数値積分の結果の信頼性を著しく損なうことは明らかであろう。それゆえハミルトン系に対しては汎用でない何か特別の専用数値解法が適用されることが当然望まれる。

1.3 ハミルトン系の性質

ここでハミルトン系の一般的性質について復習しておこう。時間 t をあらわに含まないハミルトニアン $H(q, p)$ に対するハミルトンの方程式

$$\frac{dq}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p}, \quad \frac{dp}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q} \quad (14)$$

の任意の時刻間の解の時間発展 $(q, p) \rightarrow (q', p')$ に対して一般に次の二つの保存則が知られている。まず (i) エネルギー値（ハミルトニアンの値）が保存される、つまり

$$H(q, p) = H(q', p') \quad (15)$$

次に、(ii) 写像 $(q, p) \rightarrow (q', p')$ はシンプレクティック変換（正準変換、シンプレクティック）となる、すなわちシンプレクティック形式 $dp \wedge dq$ が保存される：

$$dp \wedge dq = dp' \wedge dq' \quad (16)$$

この条件 (ii) は自由度が 1、つまり 2 次元写像の場合には面積保存の条件

$$\det \left[\frac{\partial(q', p')}{\partial(q, p)} \right] = 1 \quad (17)$$

（変換のヤコビ行列式が 1）と同等である。先に述べたのオイラー法やルンゲ・クッタ法は一般にエネルギー値を保存しないばかりか、シンプレクティック形式をも保存しない数値解法である。

そこで真の解軌道が持つ (i) $H = const.$ 及び (ii) $dp \wedge dq = const.$ なる 2 つの保存則を受け継ぐ数値積分法を探すことが当然期待される。残念ながら Ge and Marsden (1988) によれば、一般の解が解析的には求められない積分不可能なハミルトン系に対しては期待される積分法は存在しえない。その主張の理由はもし上の 2 つの保存則を持つ数値解法 $z' = \psi(z, \tau)$ が存在すれば、それは真の解そのものに他ならないということである。

そこで妥協策として 2 つの保存則のうちの一つを満足する数値解法を求めることを考えよう。エネルギー値を各ステップごとに厳密に満足する解法については以前からたくさんの研究があり、本稿では触れない。例えば、Itoh and Abe (1988, 1989) を参照のこと。一方、シンプレクティック形式を厳密に保存する数値解法をシンプレクティック数値積分法 (Symplectic Integrator) と言い、以下でその作り方および性質について詳細に議論することにする。

1.4 シンプレクティック数値積分法の歴史

シンプレクティック数値積分法の研究は主として 3 つの独立なグループによって始められた。第一のグループは北京の Feng およびその共同研究者で、母関数にもとづく陰的 (implicit) なスキームを開発した。Feng and Qin (1987, 1991) はその成果のレビューである。この陰的解法は後に Channell and Scovel (1990) によって応用された。第二のグループは Sanz-Serna (1988) および Lasagni (1988) の研究に始まる。彼らは独立に古典的な 4 次のルンゲ・クッタ法 (5) の自然な拡張である陰的ルンゲ・クッタ法がシンプレクティック

となる条件を見つけた。その結果ガウス・ルジャンドル型のルンゲ・クッタ法 (Dekker and Verwer, 1984) と呼ばれる一連の解法がシンプレクティックとなっていることが示された。そのなかで最も簡単なものは陰的中点法として知られている。第三の研究グループとして Ruth(1983) が $H = T(p) + V(q)$ なる形のハミルトン系に適用できる陽的 (explicit) なシンプレクティック積分法の構成法を提出した。このアイデアに沿ってより精度の高い高次の積分公式が Forest(1987), Neri(1988), Yoshida(1990), Suzuki(1990, 1992) らによって示された。次の2つの章では以上の陰的, および陽的なスキームについて, より詳しい説明がなされる。シンプレクティック数値積分法の一般的なレビューについては Sanz-Serna (1992), Scovel(1991) などを参照のこと。

2 陰的 (implicit) スキーム

2.1 母関数による方法

混合変数の任意の微分可能な関数 $W = W(q, p')$ に対して, 関係式

$$p = \frac{\partial W}{\partial q}, \quad q' = \frac{\partial W}{\partial p'} \quad (18)$$

によって陰的に決まる写像 $(q, p) \rightarrow (q', p')$ はシンプレクティック写像 (正準変換) となることが知られている。例えばゴールドスタイン (1984) を参照せよ。関数 W は母関数 (generating function) と呼ばれる。特にハミルトン系 (14) に対しては

$$W = qp' + \tau H(q, p') \quad (19)$$

とすれば (18) は

$$q' = q + \tau \frac{\partial H}{\partial p'}, \quad p' = p - \tau \frac{\partial H}{\partial q} \quad (20)$$

となるが, これは1次の陰的なシンプレクティック積分法と見なすことが出来る。実際 p と p' の差は τ のオーダーだから (20) が解のテイラー展開 (3) と τ の1次まで一致することは明らかであろう。2次の積分法を得るには母関数として

$$W(q, p') = qp' + \tau H(q, p') + (\tau^2/2) H_{p'} H_q \quad (21)$$

を採用すれば良く ($H_q := \partial H / \partial q$, etc.), (18) から陰的なスキーム

$$\begin{aligned} q' &= q + \tau H_{p'} + (\tau^2/2)(H_{p'p'} H_q + H_{p'} H_{p'q}) \\ p' &= p - \tau H_q - (\tau^2/2)(H_{p'q} H_q + H_{p'} H_{qq}) \end{aligned} \quad (22)$$

を得る。より高次の積分公式 ($n > 2$) も同様に写像 $(q, p) \rightarrow (q', p')$ が真の解のテイラー展開の τ^n のオーダーまで一致するように母関数 $W(q, p')$ をうまく選ぶことによって得られる。(20), (22) などは与えられた (q, p) に対してニュートン法などの反復解法によって (q', p') が数値的に計算される。Feng and Qin (1987) は4次までの母関数 $W(q, p')$ と対応するシンプレクティック積分公式を得た。また Channell and Scovel (1990) は両者を6次まで求めている。また少し別の意味での母関数による積分法も開発されている。これについては Sanz-Serna (1992) を参照せよ。

2.2 陰的ルンゲ・クッタ法

一般に微分方程式系 (1) に対して, 古典的な4次のルンゲ・クッタ法 (5) の自然な一般化である s 段のルンゲ・クッタ法 (一般には陰的解法) は次のように定義される。まず与えられた z に対してベクトル k_i を連立代数方程式

$$k_i = f \left(z + \tau \sum_{j=1}^s a_{ij} k_j \right) \quad (23)$$

$(i = 1, \dots, s)$, の解として求める. そして写像 $z \rightarrow z'$ を

$$z' = z + \tau \sum_{j=1}^s b_j k_j \quad (24)$$

によって決める. ここで a_{ij} および b_j はスキームを特徴づけるパラメーターである. a_{ij} および b_j を $s+1$ 行 s 列の行列として表した, いわゆる Butcher 表と呼ばれるテーブルがこのルンゲ・クッタ法を表現するためによく用いられる. 特に全ての $i \leq j$ に対して $a_{ij} = 0$ ならば陽的な解法となることに注意しよう. パラメーター a_{ij} 及び b_j は order conditions と呼ばれる一連の条件式 (パラメーターが満たす代数方程式) から決定される. この条件式も (24) で与えられる写像 $z \rightarrow z'$ が真の解のテイラー展開の τ の希望するオーダーまで一致するという要請から導出される.

今, (1) をハミルトン系 (14) としよう. この時, 一般のルンゲ・クッタ法に対して写像 (24) はシンプレクティックとはならない. Sanz-Serna(1988) および Lasagni(1988) はパラメーター a_{ij} および b_j が次の条件

$$M_{ij} := b_i a_{ij} + b_j a_{ji} - b_i b_j = 0, \quad (1 \leq i, j \leq s) \quad (25)$$

を恒等的に満足するなら, 写像 (24) はシンプレクティックとなることを示した. 条件 (25) が満足されるのは陰的解法に限られ, 古典的な 4 次のルンゲ・クッタ法 (5) などの陽的解法では決して満たされないことに注意しよう.

条件 (25) が満足される最も単純な場合は 1 段解法 ($s = 1$) で

$$a_{11} = \frac{1}{2}, \quad b_1 = 1 \quad (26)$$

の場合である. この時

$$k_1 = f\left(z + \frac{\tau}{2} k_1\right), \quad z' = z + \tau k_1 \quad (27)$$

あるいは一つの式で

$$z' = z + \tau f\left(\frac{z + z'}{2}\right) \quad (28)$$

となるが, これは陰的中点法 (implicit midpoint rule) として知られているものであり 2 次の解法である. 2 段法 ($s = 2$) の例としては

$$(a_{ij}) = \begin{pmatrix} \frac{1}{4} & \frac{1}{4} - \frac{\sqrt{3}}{6} \\ \frac{1}{4} + \frac{\sqrt{3}}{6} & \frac{1}{4} \end{pmatrix}, \quad (b_j) = \left(\frac{1}{2} \quad \frac{1}{2}\right) \quad (29)$$

があり, 4 次の解法となっている. Pullin and Saffman (1991) はこの 4 次の陰的ルンゲ・クッタ法を 4 個の渦の運動の数値解法に応用して良い結果を得ている. 以上の (26), (29) で与えられる陰的ルンゲ・クッタ法はガウス・ルジャンドル型のルンゲ・クッタ法と呼ばれる族のなかで最も簡単なものである. 一般に s 段のガウス・ルジャンドル型は $2s$ 次の解法となっており (Dekker and Vewer, 1984) 安定性に優れている. ガウス・ルジャンドル型でない陰的ルンゲ・クッタ法については 前田 (1990), Saito et al.(1992) らの研究がある. その他のこの方向の研究についての文献としては Sanz-Serna(1992), Sanz-Serna and Abia (1991) などを参照せよ.

3 陽的 (explicit) スキーム

3.1 基本的なアイデア

次の形のハミルトン系

$$H = T(p) + V(q) \quad (30)$$

に対しては陽的なシンプレクティック解法が存在する。1次の解法としてはオイラー法(2)にわずかな修正を加えるだけで良い。実際、

$$q' = q + \tau \left(\frac{\partial T}{\partial p} \right)_{p=p}, \quad p' = p - \tau \left(\frac{\partial V}{\partial q} \right)_{q=q'} \quad (31)$$

が求めるものである。この写像がシンプレクティックであることは2つの明らかなシンプレクティック写像 $(q, p) \rightarrow (q', p)$ と $(q', p) \rightarrow (q', p')$ の合成として考えることで容易に理解される。また1次の精度を有することも明らかであろう。また(31)で q' と p' の計算順序を逆にした

$$p' = p - \tau \left(\frac{\partial V}{\partial q} \right)_{q=q}, \quad q' = q + \tau \left(\frac{\partial T}{\partial p} \right)_{p=p'} \quad (32)$$

も1次の解法である。

より精度の高い高次のスキームを構成するには元のハミルトン方程式の解の時間発展を自明なシンプレクティック写像

$$S_T(c_i\tau): q' = q + c_i\tau \left(\frac{\partial T}{\partial p} \right), \quad p' = p \quad (33)$$

および

$$S_V(d_i\tau): q' = q, \quad p' = p - d_i\tau \left(\frac{\partial V}{\partial q} \right) \quad (34)$$

を繰り返し合成すればよい。ここで数値係数 $(c_i, d_i), (i = 1, \dots, k)$ は合成された写像 $(q, p) \rightarrow (q', p')$ が真の解のテイラー展開の τ^n のオーダーまで一致するという要請から決定される。その結果ひとつの n 次の陽的シンプレクティック積分公式が得られることになる。例えば2次のスキーム $(q, p) \rightarrow (q', p')$ は

$$q^* = q + \frac{\tau}{2} \left(\frac{\partial T}{\partial p} \right)_{p=p}, \quad p' = p - \tau \left(\frac{\partial V}{\partial q} \right)_{q=q^*}, \quad q' = q + \frac{\tau}{2} \left(\frac{\partial T}{\partial p} \right)_{p=p'} \quad (35)$$

によって得られ、これは $c_1 = c_2 = 1/2, d_1 = 1, d_2 = 0$ と選んだことに対応する。またこの2次の解法はリープ・フロッグ法 (leap-frog method) として以前から知られていたものに外ならない。Ruth(1983) は3次の解法を得るための (c_i, d_i) が満たすべき代数方程式を求め、それを解いて

$$c_1 = \frac{7}{24}, c_2 = \frac{3}{4}, c_3 = -\frac{1}{24}, d_1 = \frac{2}{3}, d_2 = -\frac{2}{3}, d_3 = 1 \quad (36)$$

を得た。Candy and Rozmus (1991) はRuth(1983) のアイデアを直接に拡張して4次の公式のための係数を得、種々の例題においてシンプレクティック解法の利点を示した。

3.2 代数的定式化

以上の陽的スキームの導出法は Neri(1987) により Lie 代数の言葉を使って再定式化された。まずハミルトン方程式を

$$\frac{dz}{dt} = \{z, H(z)\} \quad (37)$$

の形に書き直す。ここで $\{F, G\} = F_q G_p - F_p G_q$ は関数 F と G のポアッソン括弧を表す。今、線形微分作用素 D_G を

$$D_G F := \{F, G\} \quad (38)$$

で定義すれば上式は $dz/dt = D_H z$ の形に書ける。それゆえ形式解、つまり $t=0$ から $t=\tau$ までの $z(t)$ の厳密な時間発展は作用素 D_H の指数関数を使って

$$z(\tau) = [\exp(\tau D_H)]z(0) \quad (39)$$

と書ける. 特に (30) の形のハミルトニアンに対しては $D_H = D_T + D_V$ であり形式解は

$$z(\tau) = \exp[\tau(A + B)]z(0) \quad (40)$$

となる. ここで $A := D_T$ および $B := D_V$ であり, 作用素 A と B は一般に可換でない.

今 (c_i, d_i) , $(i = 1, 2, \dots, k)$ を次の等式

$$\begin{aligned} \exp[\tau(A + B)] &= \exp(c_1\tau A) \exp(d_1\tau B) \dots \exp(c_k\tau A) \exp(d_k\tau B) + o(\tau^{n+1}) \\ &= \left[\prod_{i=1}^k \exp(c_i\tau A) \exp(d_i\tau B) \right] + o(\tau^{n+1}) \end{aligned} \quad (41)$$

を満たす一組の実数としよう. ここで n は積分法の次数に対応する整数である. そして

$$z' = \left[\prod_{i=1}^k \exp(c_i\tau A) \exp(d_i\tau B) \right] z \quad (42)$$

で与えられる $z = z(0)$ から $z' = z(\tau)$ への写像を考える. この写像は自明なシンプレクティック写像の合成だから明らかにシンプレクティックであり, かつ真の解を τ^n のオーダーまで近似する. また陽に計算可能である. 実際 (42) は $z = (q_0, p_0)$ から $z' = (q_k, p_k)$ への写像

$$q_i = q_{i-1} + \tau c_i \left(\frac{\partial T}{\partial p} \right)_{p=p_{i-1}}, \quad p_i = p_{i-1} - \tau d_i \left(\frac{\partial V}{\partial q} \right)_{q=q_i} \quad (43)$$

$(i = 1, 2, \dots, k)$ としてあらわに表現できる. かくして n 次のシンプレクティック積分スキームが実現される. $n = 1$ の場合, 明らかな解は $c_1 = d_1 = 1$, $(k = 1)$ で, これは恒等式

$$\exp[\tau(A + B)] = \exp(\tau A) \exp(\tau B) + o(\tau^2) \quad (44)$$

に対応し, 1 次の積分公式 (31) を導く. $n = 2$ の場合も容易に $c_1 = c_2 = 1/2$, $d_1 = 1$, $d_2 = 0$, $(k = 2)$, が得られるが, これは恒等式

$$\exp[\tau(A + B)] = \exp\left(\frac{\tau}{2}A\right) \exp(\tau B) \exp\left(\frac{\tau}{2}A\right) + o(\tau^3) \quad (45)$$

に由来し, 2 次の積分公式 (35) を意味する.

Forest(1987), Forest and Ruth(1990), Candy and Rozmus(1991) らは直接的な方法で 4 次の積分公式のための数値係数の満たす連立代数方程式を求め, その解として

$$\begin{aligned} c_1 &= c_4 = \frac{1}{2(2 - 2^{1/3})}, \quad c_2 = c_3 = \frac{1 - 2^{1/3}}{2(2 - 2^{1/3})} \\ d_1 &= d_3 = \frac{1}{2 - 2^{1/3}}, \quad d_2 = \frac{-2^{1/3}}{2 - 2^{1/3}}, \quad d_4 = 0 \end{aligned} \quad (46)$$

を得た. この 4 次の積分スキームにおいて 1 ステップにおける力の評価回数は 3 回で済むことに注意しよう. 古典的な 4 次のルンゲ・クッタ法 (5) では力の評価は 4 回必要であった.

3.3 高次の陽的スキーム

Yoshida(1990) はまず Forest(1987) らによって得られた 4 次の積分スキーム (46) が 2 次のスキーム (35) の合成で得られることに注目した. 2 次のスキーム (35) を $z' = S_2(\tau)z$;

$$S_2(\tau) := \exp\left(\frac{\tau}{2}A\right) \exp(\tau B) \exp\left(\frac{\tau}{2}A\right) \quad (47)$$

のように表現すれば (46) で与えられる 4 次の公式 $S_4(\tau)$ は $S_2(\tau)$ を使って

$$S_4(\tau) = S_2(x_1\tau)S_2(x_0\tau)S_2(x_1\tau) \quad (48)$$

のように書き直すことができる。ここで

$$x_0 = \frac{-2^{1/3}}{2-2^{1/3}}, \quad x_1 = \frac{1}{2-2^{1/3}} \quad (49)$$

である。実際 x_0, x_1 は連立代数方程式

$$x_0 + 2x_1 = 1, \quad x_0^3 + 2x_1^3 = 0 \quad (50)$$

の解として得られるし、この解釈によって 4 次のスキーム (46) は最も簡単に導出できる。Forest et al.(1991) らはこの合成による高次の積分スキームの構成は前節の陰的解法においても有効であることを示した。

以上の 2 次のスキームの対称的な合成でより高次のスキームが構成出来るという事実は全く独立に、かつ全く異なった問題意識から Suzuki (1990) によって示された。Suzuki (1991) はさらに $n \geq 3$ の時は (41) のすべての (c_i, d_i) を正の数とする解は存在しないことを証明した。したがって (36) や (46) において負の数の係数が入ることは不可避である。6 次の積分公式は Yoshida (1990) によって

$$S_6(\tau) = S_2(w_3\tau)S_2(w_2\tau)S_2(w_1\tau)S_2(w_0\tau)S_2(w_1\tau)S_2(w_2\tau)S_2(w_3\tau) \quad (51)$$

の形で求められた。ここで (w_0, w_1, w_2, w_3) はある連立代数方程式を数値的に解いて得られるもので、3 組の値が求められた。同様に 8 次のスキームのための係数も何組か得られた。このような力の評価回数を最小にする高次のスキームの構成法の一般論が Suzuki(1992) によって見い出された。その概要は岩波講座・現代の物理学「経路積分の方法」第 6 章にまとめられている。この他の高次の陽的スキームの研究については Forest (1992), Itoh and Cai (1992), McLachlan and Atela (1991), Okunbor and Skeel (1992, 1993) などを参照せよ。

3.4 拡張された意味での陽的スキーム

以上の陽的なシンプレクティック積分法を構成するのに用いたアイデアは

$$H = H_0(q, p) + H_1(q, p) \quad (52)$$

の形を持つハミルトン系に対しても適用できる。ここで H_0 および H_1 はそれぞれ単独ならば積分可能となるハミルトニアンである。 $H = T(p) + V(q)$, なる形のハミルトニアンはこの状況の最も簡単な場合と言える。 H_0 および H_1 はそれぞれ積分可能なので、 $\exp \tau D_{H_0}$ および $\exp \tau D_{H_1}$ はそれぞれに対する作用・角変数 $(I_0, \theta_0), (I_1, \theta_1)$ を導入することによって誤差なく計算出来る。しかしこの 2 組の作用・角変数の間の代数的な変数変換は時に多くの計算時間を要し、この扱いの利点を減少させることが有りうる (Kinoshita et al. 1991)。

外惑星の運動を記述する N 体問題のハミルトニアン

$$H = \sum_{i=0}^{n-1} \frac{p_i^2}{2m_i} - \sum_{i<j} \frac{Gm_i m_j}{r_{ij}} \quad (53)$$

に対して

$$H_0 = T(p) = \sum_{i=0}^{n-1} \frac{p_i^2}{2m_i}, \quad H_1 = V(q) = - \sum_{i<j} \frac{Gm_i m_j}{r_{ij}} \quad (54)$$

と分解すれば、これは通常の陽的スキームを与える。一方 Wisdom and Holman (1991) はいわゆるヤコビ座標を用いてハミルトニアン (53) を純粋なケプラー運動の重ね合わせの部分と残りの摂動の部分

$$H = H_0 + H_1 = H_{Kepler} + H_{Perturbation} \quad (55)$$

の形に書き、上記の意味での2次のシンプレクティック積分法を適用した。用いたステップサイズは $\tau = 1$ 年であり、 10^9 年に及ぶ積分が実行された。ケプラー問題の部分 $\exp \tau D_{H_0}$ の計算のためには特にガウスの f, g 関数が用いられた。著者らは以前の数値計算 Sussman and Wisdom (1988) の主要な特徴をはるかに少ない計算時間ですべて再現し、冥王星の運動のカオス性を確認した。この例のように一般に与えられたハミルトニアンに対して二つの積分可能な部分に分解する方法は一通りでないことがあり、どの分解がベストであるかは問題の性質および数値計算の目的に依存する。

4 シンプレクティック積分法によるエネルギーの保存

4.1 調和振動子の場合

ハミルトン系の解の時間発展はハミルトニアン (エネルギー) の値を保存する。よって数値解法もこの事実を尊重することが当然望まれる。条件 (25) を満足する陰的ルンゲ・クッタ法によって2次式の積分はすべて厳密に保存される (Sanz-Serna, 1988)。よってハミルトニアン自身が2次式で書ける線形なハミルトン系に対して、シンプレクティックな陰的ルンゲ・クッタ法はハミルトニアン、シンプレクティック形式の両方を同時に保存する。これが可能なのは線形ハミルトン系が積分可能系であるからに他ならない。一般の積分不可能な系に対してはシンプレクティック解法は各ステップにおいてエネルギーを厳密に保存することは Ge and Marsden (1988) の主張により不可能なのである。それにも係わらず、シンプレクティック解法はエネルギーの保存に関して以下に述べる理由から有利である。

1次の陽的スキーム (31) を1次元の調和振動子の方程式 (7) に適用してみよう。得られるシンプレクティック写像は

$$\begin{pmatrix} q' \\ p' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & \tau \\ -\tau & 1 - \tau^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} \quad (56)$$

となり、各ステップにおいてエネルギーが保存されない (i.e., $p'^2 + q'^2 \neq p^2 + q^2$) ことが容易にわかる。しかしながら写像 (56) の繰り返しによってはオイラー法の場合と異なりエネルギーの誤差は一方向的には増大せず、ある範囲で振動するのみである。図2にこの比較を示した。一次元の調和振動子の場合この現象は、写像 (56) に対して厳密に存在する保存量 (積分)

$$\frac{1}{2}(p^2 + q^2) + \frac{\tau}{2}pq = \text{const.} \quad (57)$$

が存在することによって説明出来る。十分小さな τ に対して、初期条件 $(q, p) = (1, 0)$ をとった時、写像 (56) の繰り返しで得られる点列は (q, p) 平面内の主軸が4.5度傾いた楕円 $q^2 + p^2 + \tau pq = 1$ 上に常にのるが (図3)、この楕円は真の解 $q^2 + p^2 = 1$ と τ のオーダーしか異ならない。つまり打ちきり誤差によって発生するエネルギーの誤差はある範囲を振動するに留まり永久に増大しえないわけである。

4.2 一般の力学系の場合

実際、次のより一般的な主張が可能である。

定理：シンプレクティック写像 (31) は τ の形式的ベキ級数展開

$$\tilde{H} = H + \tau H_1 + \tau^2 H_2 + \tau^3 H_3 + \dots \quad (58)$$

Error of energy

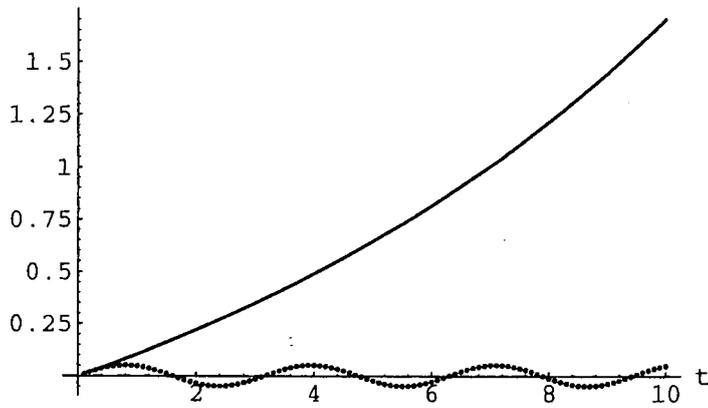


図 2: 調和振動子の場合のオイラー法 (実線) と 1 次の陽的シンプレクティック法 (点線) によるエネルギーの誤差. ステップサイズは共に $\tau = 0.1$

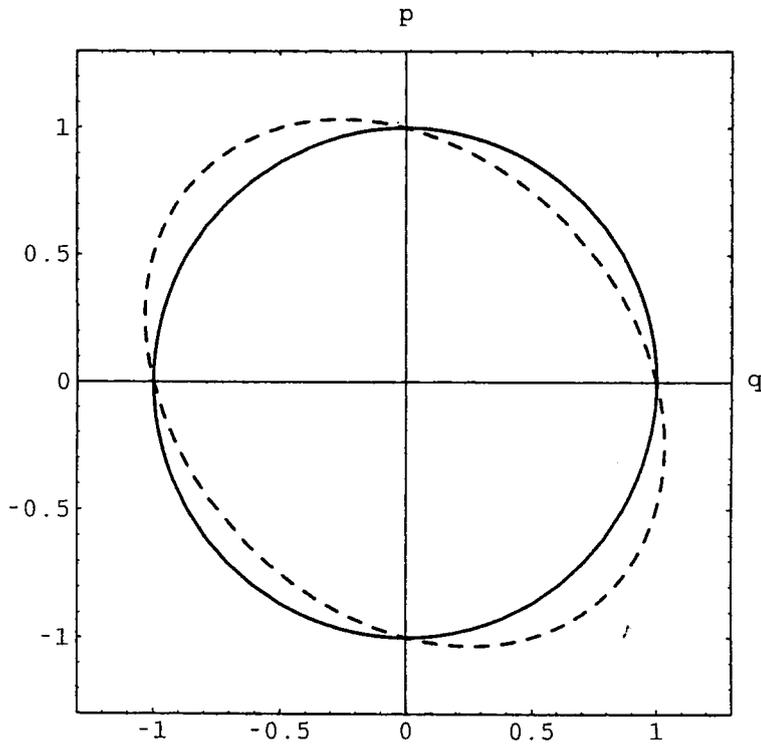


図 3: 調和振動子の真の解 (単位円) と 1 次の陽的シンプレクティック法による解 (楕円)

で定義される「摂動」ハミルトン系の時間間隔 τ に対する時間発展を厳密に記述する。ここで H は元のハミルトニアン (30) であり、

$$H_1 = \frac{1}{2}H_p H_q, \quad H_2 = \frac{1}{12}(H_{pp}H_q^2 + H_{qq}H_p^2), \quad H_3 = \frac{1}{12}H_{pp}H_{qq}H_p H_q, \dots \quad (59)$$

特に写像 (31) は \tilde{H} を保存量とする。

筆者の知る限りでは、この事実は Dragt and Finn (1976) によって最初に指摘されたが、数値積分法としては意識されていなかったようである。Dragt et al.(1988) も参照せよ。この主張からより一般的なハミルトン系 (30) に対しても、1 次の陽的スキーム (31) によるエネルギーの誤差は τ のオーダーにとどまることになる。級数 (58) は Baker-Campbell-Hausdorff (BCH) の公式から簡単に導かれる。BCH の公式 (Varadarajan, 1974) とは非可換な作用素 X と Y の指数関数の積を一つの作用素の指数関数

$$\exp X \exp Y = \exp Z \quad (60)$$

として表すもので、最初の数項は

$$Z = X + Y + \frac{1}{2}[X, Y] + \frac{1}{12}([X, [X, Y]] + [Y, [Y, X]]) + \frac{1}{24}[X, [Y, [Y, X]]] + \dots \quad (61)$$

と書ける。ここで $[X, Y] := XY - YX$ (交換子) であり、 X, Y の 1 次の項を除いて右辺はすべて高次の交換子のみを用いて表現できているのが本質的である。1 次のシンプレクティック積分法 (31) に対しては、BCH の公式 (61) およびヤコビの恒等式 $[D_T, D_V] = D_{\{V, T\}}$ から

$$(\exp \tau D_T)(\exp \tau D_V) = \exp \tau D_{\tilde{H}} \quad (62)$$

を得る。ここで

$$\begin{aligned} \tilde{H} &= T + V + \frac{\tau}{2}\{V, T\} + \frac{\tau^2}{12}(\{\{T, V\}, V\} + \{\{V, T\}, T\}) + \frac{\tau^3}{24}\{\{\{T, V\}, V\}, T\} + \dots \\ &= H + \frac{\tau}{2}H_p H_q + \frac{\tau^2}{12}(H_{pp}H_q^2 + H_{qq}H_p^2) + \frac{\tau^3}{12}H_{pp}H_{qq}H_p H_q + \dots \end{aligned} \quad (63)$$

であり、定理が証明される。2 次の積分法 (35) についても BCH の公式を繰り返し適用することによって

$$(\exp \frac{\tau}{2} D_T)(\exp \tau D_V)(\exp \frac{\tau}{2} D_T) = \exp \tau D_{\tilde{H}_{2nd}} \quad (64)$$

なる表式が導かれる。ここで

$$\begin{aligned} \tilde{H}_{2nd} &= T + V + \tau^2 \left(\frac{1}{12}\{\{T, V\}, V\} - \frac{1}{24}\{\{V, T\}, T\} \right) + o(\tau^4) \\ &= H + \tau^2 \left(\frac{1}{12}H_q^2 H_{pp} - \frac{1}{24}H_p^2 H_{qq} \right) + o(\tau^4) \end{aligned} \quad (65)$$

である。より一般に n 次のスキームに対してはシンプレクティック写像を生成する「摂動」ハミルトニアンは

$$\tilde{H}_{nth} = H + \tau^n H_n + o(\tau^{n+1}) \quad (66)$$

となり、エネルギーの誤差は τ^n のオーダーに留まることがわかる。しかし注意すべきは級数 (58), (65), (66) などの厳密な意味での収束性は調和振動子でない一般の非線形系に対しては保証されていないことである。関連した研究が Auerbach and Friedman (1991), Friedman and Auerbach (1991) にもある。

母関数による陰的スキーム (20), (22) に対しても同じような議論が可能である。母関数 (19), (21) によって定義された恒等変換に近い陰的なシンプレクティック写像は常に陽的なシンプレクティック写像

$$z' = (\exp \tau D_{\tilde{H}})z \quad (67)$$

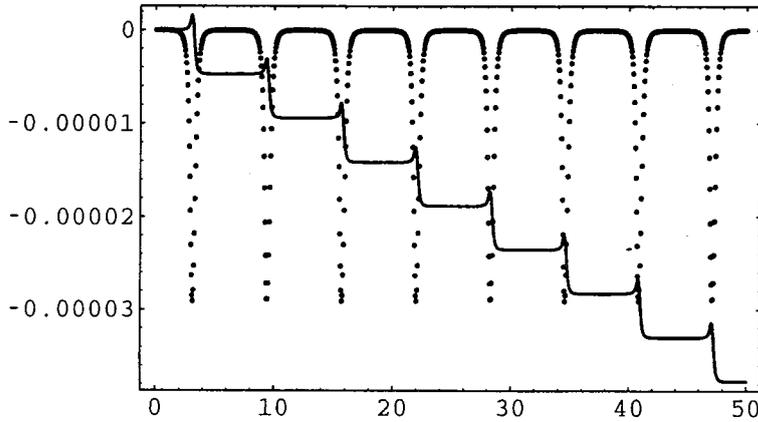


図 4: 離心率 $e = 0.5$ のケプラー楕円軌道の RK4 (実線) と SI4 (点線) によるエネルギーの誤差. 横軸は時刻 t , $\tau = 0.05$ の一定ステップ

に書き換えることができる. この事実は天体力学の分野において von-Zeipel と Hori による摂動理論の同等性として知られている (Mersman 1971, Giacaglia 1972). よって再び τ の形式的級数として表現される \tilde{H} が保存量となる. 特に 1 次の陰的スキーム (20) に対して \tilde{H} の具体形は

$$\tilde{H} = H - \frac{\tau}{2} H_p H_q + \frac{\tau^2}{12} (H_{pp} H_q^2 + H_{qq} H_p^2 + 4H_{pq} H_p H_q) + \dots \quad (68)$$

となる. 条件 (25) をみたく陰的ルンゲ・クッタ法についての同様な議論は McLachlan and Atela (1992) を参照せよ.

5 可変時間ステップ

ケプラー問題などで比較的離心率の大きな楕円軌道を数値的に求める際には一定のステップ (刻み幅) ではなく可変時間ステップを用い精度が落ちるのを防ぐのが常套手段である. 衝突に近い軌道の場合は不可欠となる. そこでシンプレクティック積分法を可変時間ステップで用いるという考えが当然生じる. ところが結果は残念ながら思わしくなく, エネルギーの誤差が増大し始める. つまりシンプレクティック積分法の利点であった「エネルギーの誤差が増大しない」という特質が失われてしまうのである. 図 4 はハミルトニアン

$$H = \frac{1}{2}(p_1^2 + p_2^2) - \frac{1}{r}, \quad r := \sqrt{q_1^2 + q_2^2} \quad (69)$$

で記述される平面ケプラー運動を 4 次のルンゲ・クッタ法 (RK4) と 4 次の陽的シンプレクティック法 (SI4) によって刻み幅一定で数値積分し各時刻におけるエネルギー値の誤差 $H(t) - H(0)$ をプロットしたものである. $t = 0$ における初期値としては

$$(q_1, q_2, p_1, p_2) = (1 + e, 0, \sqrt{(1 - e)/(1 + e)}, 0), \quad e = 0.5 \quad (70)$$

を採用した. この初期値に対して軌道長半径 (a), 離心率 (e), 周期 (T) はそれぞれ $a = 1, e = 0.5, T = 2\pi$ となる. また初期時刻 $t = 0$ は楕円軌道上の遠心点に相当する. 一定の刻み幅 $\tau_{const} = 0.05$ で 1000 ステップ (約 8 周期) 計算している. 4 次のルンゲ・クッタ法の場合, 本来保存されるべきエネルギー値は階段

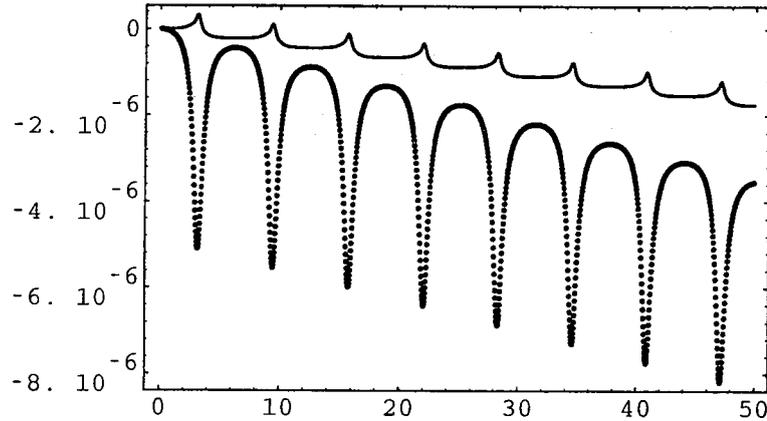


図 5: 離心率 $e = 0.5$ のケプラー楕円軌道の RK4 (実線) と SI4 (点線) によるエネルギーの誤差. 横軸は時刻 t . 可変時間ステップ

関数的に減少している. 速度が大きくなる軌道の近心点の近くでエネルギー値が大きく変化して誤差を生んでいることに注意しよう. 一方 4 次の陽的シンプレクティック法の場合, 近心点の近くでエネルギー値は大きく振れはするものの元の値に復帰し, 全体として誤差のオーダーは増大していない. これは前節で述べた保存量 $\tilde{H} = const.$ が存在することによる.

図 5 は両者の比較を可変ステップで行なった結果である. 可変ステップの一つのとりかたとして各ステップにおいて刻み幅 τ_{var} を

$$\tau_{var} = r(q_1, q_2) \tau_{const} \quad (71)$$

によって計算し積分を実行している. 楕円軌道上速度が大きくなる近心点の近くでは平均より小さな刻み幅, 速度が小さくなる遠心点の近くでは大きな刻みを自動的に採用することを (71) は意味している. 動径 r の時間平均が 1 であるため 1000 ステップ後の時刻は固定ステップの場合と同じく $t = 50$ となる. 4 次のルンゲ・クッタ法の場合, 一定ステップと可変ステップを比較すると明らかに可変ステップの方が優れていると言える. エネルギーの誤差は可変ステップの時には一定ステップの時と比べて一桁以上小さくなっている. 一方シンプレクティック積分法 (SI4) の場合, 一定ステップの時には存在しなかったエネルギーの誤差の永年の増大が可変ステップによって出現し, 誤差の絶対値自身も RK4 によるものよりも大きくなっている. 前節に於いてエネルギーの誤差が一定範囲に留まるとした議論は一定のステップサイズ τ を持つ写像の単なる繰り返しが仮定されており, 可変ステップの場合にはそのままでは適用出来ない. つまりシンプレクティック積分法を使用する時は可変ステップを使うことの積極的な利点は現在の所, 無いと言わざるを得ない.

この話題についてのさらに詳しい議論については Calvo and Sanz-Serna (1993), Gladman et al. (1991) を参照せよ.

6 結び

以下に本稿で述べた主な内容を箇条書きにまとめてみる.

- 通常のオイラー法, ルンゲ・クッタ法などの数値積分法をハミルトン系に適用するとエネルギーの誤差が単調に増大する.
- シンプレクティック数値積分法は各ステップごとの写像 $(q, p) \rightarrow (q', p')$ がシンプレクティック形式 $dp \wedge dq$ を保存する数値解法である.
- 任意のハミルトン系に対して陰的 (Implicit) なシンプレクティック積分法が (i) 母関数による方法, (ii) 陰的ルンゲ・クッタ法, によって実現出来る.
- 2つの積分可能系の和として与えられたハミルトン系に対しては陽的 (Explicit) なスキームが構成できる. $H = T(p) + V(q)$ の形の系はその代表である.
- n 次のシンプレクティック数値積分法は τ を刻み幅として $\tilde{H} = H + o(\tau^n) = const.$ なる保存量を有し, その結果としてエネルギーの誤差は $o(\tau^n)$ に留まり増大しない.
- シンプレクティック解法を可変ステップで実行するとエネルギーの誤差が永年的に増大し始める.

数値積分法としてはまだ研究の歴史が浅く, 使い勝手の良い道具となるためには多くの解決すべき問題点が残されている. 今後の研究が待たれる次第である. (1993年5月)

参考文献

- [1] Auerbach, S.P. and Friedman, A.: 1991, 'Long-time behaviour of numerically computed orbits : small and intermediate timestep analysis of one-dimensional systems', *J. Comp. Phys.* **93**, 189-223
- [2] Calvo, M.P. and Sanz-Serna, J.M.: 1993, 'The development of variable-step symplectic integrators, with application to the two-body problem', *SIAM J. Sci. Comput.* **14**, 936-952
- [3] Candy, J. and Rozmus, W.: 1991, 'A symplectic integration algorithm for separable Hamiltonian functions', *J. Comp. Phys.* **92**, 230-256
- [4] Channell, P.J. and Scovel, J.C.: 1990, 'Symplectic integration of Hamiltonian systems', *Nonlinearity* **3**, 231-259
- [5] Dekker, K. and Verwer, J.G.: 1984, *Stability of Runge-Kutta methods for stiff nonlinear differential equations*, North-Holland
- [6] Dragt, A.J. and Finn, J.M.: 1976, 'Lie series and invariant functions for analytic symplectic maps', *J. Math. Phys.* **17**, 2215-2227
- [7] Dragt, A.J., Neri, F., Rangarajan, G., Douglas, D.R., Healy, L.M. and Ryne, R.D.: 1988, 'Lie algebraic treatment of linear and nonlinear beam dynamics', *Ann. Rev. Nucl. Part. Sci.* **38**, 455-496
- [8] Feng, K. and Qin, M.: 1987, 'The symplectic methods for the computation of Hamiltonian equations', *Lecture Note in Math.* **1297**, 1-37
- [9] Feng, K. and Qin, M.: 1991, 'Hamiltonian algorithms for Hamiltonian systems and a comparative numerical study', *Comput. Phys. Commun.* **65**, 173-187
- [10] Forest, E.: 1989, 'Canonical integrators as tracking codes', *AIP Conference Proceedings* **184**, 1106-1136

- [11] Forest, E.: 1992, 'Sixth-order Lie group integrators', *J. Comp. Phys.* **99**, 209-213
- [12] Forest, E., Bengtsson, J. and Reusch M.F.: 1991, 'Application of the Yoshida-Ruth techniques to implicit integration and multi-map explicit integration', *Phys. Lett. A* **158**, 99-101
- [13] Forest, E. and Ruth, R.D.: 1990, 'Fourth-order symplectic integration', *Physica D* **43**, 105-117
- [14] Friedman, A. and Auerbach, S.P.: 1991, 'Numerically induced stochasticity', *J. Comp. Phys.* **93**, 171-188
- [15] Ge, Z. and Marsden, J.E.: 1988, 'Lie-Poisson Hamilton-Jacobi theory and Lie-Poisson integrators', *Phys. Lett. A* **133**, 134-139
- [16] Giacaglia, G.E.O.: 1972, *Perturbation methods in non-linear systems*, Springer
- [17] Gladman, B., Duncan, M. and Candy, J.: 1991, 'Symplectic integrators for long-term integrations in celestial mechanics', *Celest. Mech.* **52**, 221-240
- [18] ゴールドスタイン: 1984, 古典力学 (下), 吉岡書店
- [19] Itoh, T. and Abe, K.: 1988, 'Hamiltonian-conserving discrete canonical equations based on variational difference quotients', *J. Comp. Phys.* **77**, 85-102
- [20] Itoh, T. and Abe, K.: 1989, 'Discrete Lagrange's equations and canonical equations based on the principle of least action', *Applied Math. Comp.* **29**, 161-183
- [21] Itoh, T. and Cai, D.S.: 1992, 'Fractal dimension and convergence property of recursively generated symplectic integrators', *Phys. Lett. A* **171**, 189-198
- [22] Kinoshita, H., Yoshida, H. and Nakai, H.: 1991, 'Symplectic integrators and their application to dynamical astronomy', *Celest. Mech.* **50**, 59-71
- [23] Lasagni, F.: 1988, 'Canonical Runge-Kutta methods', *ZAMP* **39**, 952-953
- [24] 前田茂: 1990, 'ある種の Runge-Kutta 型公式と線形系の軌道再現について', 電子情報通信学会論文誌 A **J73-A**, 1648-1653
- [25] McLachlan, R. and Atela, P.: 1991, 'The accuracy of symplectic integrators', *Nonlinearity* **5**, 541-562
- [26] Mersman, W.A.: 1971, 'Explicit recursive algorithms for the construction of equivalent canonical transformations', *Celest. Mech.* **3**, 384-389
- [27] Miesbach, S. and Pesch, H.J.: 1992, 'Symplectic phase flow approximation for the numerical integration of canonical systems', *Numer. Math.* **61**, 501-521
- [28] Neri, F.: 1987, 'Lie algebras and canonical integration', Dept. of Physics, University of Maryland, preprint
- [29] Okunbor, D.: 1992, 'Canonical methods for Hamiltonian systems: numerical experiments', *Physica D* **60**, 314-322
- [30] Okunbor, D. and Skeel, R.D.: 1992, 'An explicit Runge-Kutta-Nystrom method is canonical if and only if its adjoint is explicit', *SIAM J. Numer. Anal.* **29**, 521-527

- [31] Okunbor, D. and Skeel, R.D.: 1993, 'Canonical Runge-Kutta-Nystrom methods of order 5 and 6', *J. Comput. Appl. Math.* ,
- [32] Pullin, D.I. and Saffman, P.G.: 1991, 'Long time symplectic integration, the example of four-vortex motion', *Proc. R. Soc. London A* **432**, 481-494
- [33] Ruth, R.D.: 1983, 'A canonical integration technique', *IEEE Trans. Nucl. Sci.* **NS-30**, 2669-2671
- [34] Saito, S., Sugiura, H. and Mitsui, T.: 1992, 'Family of symplectic implicit Runge-Kutta formulae', *BIT* **32**, 539-543
- [35] Sanz-Serna, J.M.: 1988, 'Runge-Kutta schemes for Hamiltonian systems', *BIT* **28**, 877-883
- [36] Sanz-Serna, J.M.: 1992, 'Symplectic integrators for Hamiltonian problems : an overview', *Acta Numerica* **1**, 243-286
- [37] Sanz-Serna, J.M.: 1992a, 'Symplectic Runge-Kutta and related methods: recent results', *Physica D* **60**, 293-302
- [38] Sanz-Serna, J.M. and Abia, L.: 1991, 'Order conditions for canonical Runge-Kutta schemes', *SIAM J. Numer. Anal.* **28**, 1081-1096
- [39] Sanz-Serna, J.M. and Calvo, M.P.: 1994, *Numerical Hamiltonian Problems*, Chapman and Hall
- [40] Scovel, C: 1991, 'Symplectic numerical integration of Hamiltonian systems', in *The geometry of Hamiltonian systems*, Ratiu, T. ed., Springer, 463-496
- [41] Sussman, G.J. and Wisdom, J.: 1988, 'Numerical evidence that the motion of Pluto is chaotic', *Science* **241**, 433-437
- [42] Suzuki, M.: 1990, 'Fractal decomposition of exponential operators with applications to many-body theories and Monte Carlo simulations', *Phys. Lett. A* **146**, 319-323
- [43] Suzuki, M.: 1991, 'General theory of fractal path integrals with applications to many-body theories and statistical physics', *J. Math. Phys.* **32**, 400-407
- [44] Suzuki, M.: 1992, 'General theory of higher-order decomposition of exponential operators and symplectic integrators', *Phys. Lett. A* **165**, 387-395
- [45] Varadarajan, V.S.: 1974, *Lie groups, Lie algebras and their representations*, Prentice-Hall
- [46] Wisdom, J. and Holman, M.: 1991, 'Symplectic maps for the N-body problem', *Astron. J.* **102**, 1528-1538
- [47] Yoshida, H.: 1990, 'Construction of higher order symplectic integrators', *Phys. Lett. A* **150**, 262-268
- [48] Yoshida, H.: 1993, 'Recent progress in the theory and application of symplectic integrators', *Celest. Mech.* **56**, 27-43
- [49] 吉田春夫: 1995, 'シンプレクティック数値解法', *数理科学* **384**, 37-46