On Timestep Symmetrization

Junichiro Makino
College of Arts and Science
The University of Tokyo
3-8-1 Komaba, Meguro-ku, Tokyo 153, Japan

Abstract

Time-symmetric integrators have very good property that the total energy and other integrals of motion have no secular error. Unfortunately, when the variable timestep is used this good property is lost. We present an algorithm that restores the good conservation of integrals when applied to variable timestep algorithm. The essential point is that the timestep must be chosen so that it guarantees the time-reversibility of the intergration scheme.

1 はじめに

時間対称な積分公式は、ハミルトン系の時間積分に広く使われている。時間対称な公式のうちもっとも簡単なものは2次のリープフロッグ (バーレット) であり、様々な分野で広く使われている。リープフロッグは以下の3つの特色を持つ。まず、一段公式であり、時間反転に対して対称である。すなわち、1ステップ積分した後で逆方向に同じ時間きざみで積分すると、丸め誤差の範囲で元の位置、速度に戻る。第二に、陽公式である。第三に、シンプレクテック公式でもある。このシンプレクテックであるということと、時間反転に対し対称であるということのどちらに意味があるかはいまのところ明らかではないようであるが、いずれにしても時間刻み一定のリープフロッグは調和振動子に適用した時に永年誤差がないことは古くからしられており、このために構造解析、あるいは分子動力学といった、ハミルトニアンがローカルには多数の調和振動子とみなして良いような分野では広く用いられてきた。また、天体物理学においても、宇宙論や銀河動力学といった、タイムスケールが大きく変化しない問題では普通に使われている。

リープフロッグは対称型公式 (時間反転に関して) やシンプレクテック公式のなかでもっとも簡単なもののひとつである。より高次の対称型公式やシンプレクテック公式は、惑星軌道の長時間積分といった永年誤差がないことが特に重要な問題に用いられ、大きな成功をおさめている (Quinlan and Tremaine 1990, Kinoshita et al. 1991)。

しかし、対称型公式 (時間反転に関して) やシンプレクテック公式には、大きな問題があることがしばらく前からわかってきた。Calvo and Sanz Serna (1993,1994) は、ルンゲ・クッタ・ナイストレム型のシンプレクテック積分公式で埋め込み型のもの、すなわちルンゲ・クッタ公式で計算した加速度を使って、1次低い公式を構成できるものを導き、これにより標準的な方法で時間刻みの自動調節をすることを試みた。

彼らの結果は期待していたものとは大きく違っていた。離心率0.5のケプラー問題を時間積分した時、刻み一定のシンプレクテック公式では確かに永年誤差がなく、その結果長

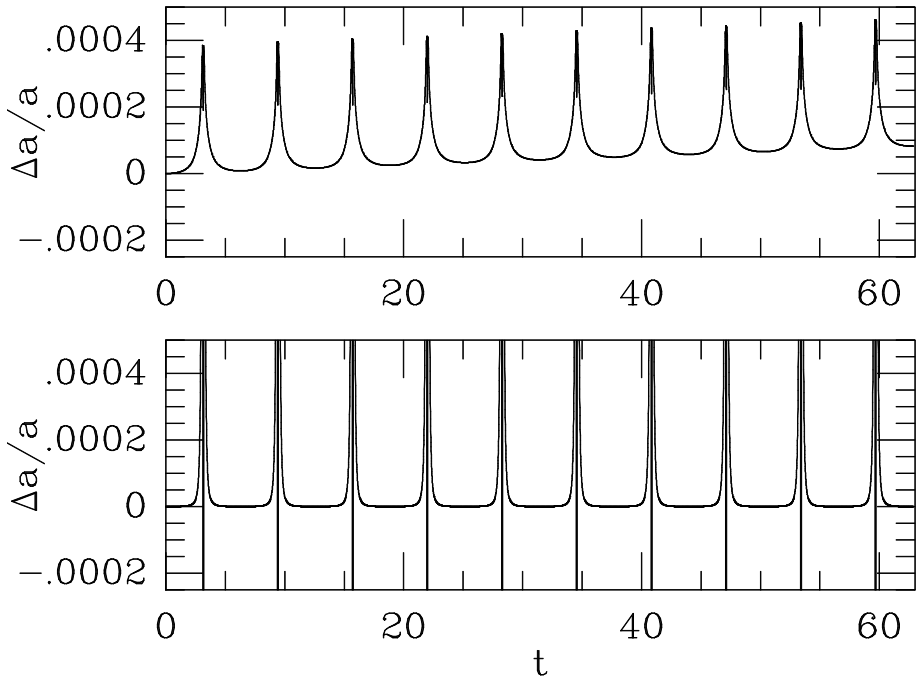

図 1: The relative error of the semi-major axis a plotted against time, for 10 orbital periods of kepler orbit with eccentricity $e = 0.9$. The leapfrog integrator is used. The upper panel shows the result of the variable stepsize and the lower panel the constant stepsize.

時間積分では同じ次数の時間刻み可変でシンプレクテックでない公式よりも誤差が小さくなった。しかしながら時間刻み可変のシンプレクテック公式では永年誤差がでてしまい、シンプレクテックでない公式よりもさらに誤差が大きくなってしまったのである。一般的にいってシンプレクテック型、あるいは対称型の公式の局所誤差は普通の公式よりも大きい。これは普通の公式では局所誤差を小さくするのに使える係数の自由度を別の目的に使ってしまっているからである。永年誤差がなくなれば局所誤差が大きくても長時間積分すれば得になるが、通常の公式と同じように永年誤差が出てしまえば局所誤差が大きい分損になってしまうわけである。この結果から、彼らはシンプレクテック公式では時間刻みを変えてはいけないと結論している。

図 1 にリープフロッグを使って時間刻み可変にした計算例を示す。これは離心率 0.9 のケプラー問題を 10 周期積分し、軌道長半径の変化をプロットしたものである。積分は遠心点からはじめていて、軌道周期は 2π である。上は $0.01 \min(|r|/|v|, t_{ff})$ という式でステップ可変にした結果である（t_{ff} は速度 0 とした時の自由落下時間）。下は時間刻み一定（1/128）で積分したものである。一周期積分した時の最大誤差は時間刻み可変の方がずっと小さい（時間刻み一定の場合の誤差はグラフからはみでている）が、一周期積分して遠心点に戻ってきた時には時間刻み一定ではもとの値に戻っているように見えるのに対し、可変刻みでは完全には戻っていない。このために長時間積分するとどんどん誤差が積もっていくことになる。

本論文では、対称型の公式については時間刻みの取り方を工夫することで永年誤差をなくせることをしめす (Hut, et al. 1995)。本論文は以下のような構成をとる。まず 2 節

では周期的な運動の場合に何故時間刻み可変な公式がうまくいかないかという直観的な説明を与え、３節でこの直観的な理解に基づきうまくいきそうなアルゴリズムを与える。４節ではケプラー運動の場合について数値実験の結果を与え、実際にうまくいくことを示す。５節ではいくつかの話題を扱う。まず、最近、 Cano と Sanz Serna(1995) が我々の方法は周期運動に対して時間２次の誤差を持たないということを示したので、その意義について述べる。さらに Lake et al. (1995) がリープフロッグに限るが Individual timestep algorithm を実現する方法を導いているのでその原理を紹介し、高次の場合への適用可能性について考察する。

2　なぜ可変時間刻みはうまく働かないか

なぜ可変刻みでは例えばエネルギーが保存しないのかというのは、図 1 を見れば明らかである。つまり、一定刻みの場合には、局所誤差は大きいが、その出方が遠心点から近心点に近付いていく時とその逆とで符号が逆で絶対値が同じようになっている。このために一周期回ったところでは誤差がなくなっているわけである。これに対し可変刻みでは、近心点に近付いていく時とその逆とで誤差の符号は逆になっているが値が正確には同じではない。このために一周したあとでずれてしまうわけである。

一定刻みではうまく動いて可変刻みではうまく動かないのだから、刻みを変えたことが原因なのは明らかである。しかし、どのようにそれが影響しているのだろうか。まず、運動方程式自体は時間反転に対して対称である。さらに、一定刻みの場合積分公式も時間反転に対して対称であった。従って、例えば時刻 t_0 から $t_1 = t_0 + n\Delta t$ まで積分して、それから時間の進み方を逆にして積分して t_0 まで戻っても、 (丸め誤差とその exponential divergence の範囲内では) 元の値に戻るはずである。逆に積分していくと元に戻る積分公式では、保存量に永年誤差があるということは考えにくい。何故なら、永年誤差があって例えば t_0 から t_1 までで例えばエネルギーが減っていたとすると、 t_1 から t_0 まで積分してもやはりエネルギーが減っていそうである。ところが t_0 まで積分すれば (丸め誤差の範囲内では) 初期条件に戻っているのだから、すべての保存量はもちろん元の値に戻っている。行きでも帰りでもエネルギーが減っていてしかも元の値に戻るということは不可能なので、行きでも帰りでもエネルギーが変わっていない必要がある。 (これはもちろん厳密な証明ではない)

さて、可変刻みでは何が起こっているのだろう ?すぐにわかることは、そもそも元の位置に戻るかどうかわからないということである。例えば時刻 t_0 から 1 ステップ積分して $t_1 = t_0 + \Delta t_0$ になったとしてみる。ここで時間反転して積分するためには、 t_1 で新しい時間刻み Δt_1 を計算して、これを使って $t_0' = t_1 - \Delta t_1$ まで戻ることになる。可変刻みというからには $\Delta t_0 \neq \Delta t_1$ なので、時間を逆に進んでも元の時刻には戻らない。すなわち、時間刻みが時間反転に対して対称ではないわけである。このために、いま $\Delta t_1 < \Delta t_0$ だとすれば、行きに比べて帰りはより正確に計算され、誤差が小さくなってしまうことになる。

誤差が小さくなるというのは、一見別に悪いことではないと思われるかも知れないが、永年誤差がなくなるのは上で述べたように行きと帰りの誤差が厳密にキャンセルするということによっているので、これが等しくならなければ一周したときに誤差が残ってしまうことになる。図 1 のケプラー運動の場合、近心点に近いほど時間刻みは短くなる。このた

めに近心点に近付いていく時は時間刻みが大きめに、逆に遠ざかっていくときは小さめになり、そのために遠ざかっていく時の誤差が少し小さくなってしまうわけである。

3 時間刻み対称化

時間刻みが対称でないというのが永年誤差がでる原因だとすれば、対称にしてしまえば永年誤差がなくなるかも知れない。対称にするとは、上の例では時刻 t_0 で計算した時間刻み Δt_0 と 逆に戻る時に t_1 で計算した時間刻み Δt_1 が等しくなるようにするということである。このためには、時間刻みが時刻 t_0 と時刻 t_1 の情報を同じ重みで使っていれば良い。一つの可能性は以下のようなものである。

$$\Delta t = \frac{1}{2}[h(\xi_0) + h(\xi_1)] \tag{1}$$

ここで ξ_0 は時刻 t_0 での位置と速度であり、 $h(\xi)$ は適当な時間刻みを与える関数である。つまり、積分の始点と終点で時間刻みをそれぞれ計算して、その平均を取るわけである。こうすれば、逆に戻った時にも時間刻みが等しくなることが保証される。ここで注意しないといけないのは、ξ_1 は Δt の関数であるということである。このために、式 (1) は Δt をインプリシットに決める方程式になっていて、何らかの方法で解く必要がある。

解くもっとも簡単な方法は、予測子修正子法でやるように

$$\xi_1^{(k)} = f(\xi_0, \xi_1^{(k-1)}, \Delta t^{(k-1)}), \tag{2}$$

$$\Delta t^{(k)} = \frac{1}{2}[h(\xi_0) + h(\xi_1^{(k)})] \tag{3}$$

という反復をすることである。ここで $f(\xi_0, \xi_1, \Delta t)$ は積分公式を形式的に関数の形でかいたものであり、$\xi_1^{(k)}$はξ_1の k回めの近似値である。このやり方は収束は一次で速くはないが、初期推定が良ければ数回で収束する。なお、リープフロッグの場合は積分公式自体は陽公式なので fは ξ_0 と Δt だけの関数でξ_1 にはよらないが、例えば 4 次のエルミート公式、あるいはガウス型の陰的ルンゲ・クッタといった陰公式を使う場合は、座標と時間刻みの両方を収束させる必要がある。上の方法では両方同時に収束させることができる。

初期推定は、もっとも簡単な方法は単に $h(\xi_0)$ を使うことである。この初期値を使って式 (2)、(3) で反復をした場合は、収束が遅く、十分な精度を得るためには 5-10 回程度の反復が必要になる。これは現実的ではないので、以下高速化の手法をいくつか述べる。

高速化の方法は基本的には 2 通りある。一つは初期推定を改善することであり、もう一つは収束を速くすることである。以下順に述べる。初期推定を改善するには、いくつかの前の時刻の値から外挿すればいい。もっとも簡単には、

$$\Delta t^{(0)} = 2h(\xi_0) - \Delta t_{prev} \tag{4}$$

とする方法が考えられる。ここでΔt_{prev} は前のステップで使った時間刻みである。h が滑らかな関数であればこれで初期推定は大きく改善される。より高次の外挿式もラグランジュ補間公式から作ることができる。

収束を速くするには、ニュートン法的な方法を使えばいい。解析的に時間刻みの導関数を求めるのは現実的ではないので、 false point method などの疑似ニュートン法を使うことになる。我々は以下の式が良い結果を示すことを見い出した (Hut et al. 1995)。

$$\Delta t^{(k+1)} = h(\xi_0) + \frac{[h(\xi_1^{(k)}) - h(\xi_0)][h(\xi_1^{(k)}) + h(\xi_0)]}{4\Delta t^{(k)}} \tag{5}$$

我々の経験では、上の方法を使うことにより初期推定に $h(\xi_0)$ を使った場合でも 2-3 回で相対誤差 10^{-10}程度まで収束している。

時間刻みだけを改良しても全体の収束は速くならない。これは、座標値が時間の残差の一次のオーダの誤差を持つからである。(2) 式と (5) 式を組み合わせると、$\xi_1^{(k)}$は時間刻み$\Delta t^{(k-1)}$を使って計算されているのに、その$\xi_1^{(k)}$と$\Delta t^{(k)}$から、すなわち$\xi_1^{(k)}$が$\Delta t^{(k)}$のところで求まっているとして、$\xi_1^{(k+1)}$を計算することになってしまう。

この問題を解決するには、$\xi_1^{(k)}$が$\Delta t^{(k)}$での値になるように以下のような補正をすればいい。

$$\xi_p^{(k)} = f(\xi_0, \xi_1^{(k-1)}, \Delta t^{(k-1)}), \tag{6}$$

$$\xi_1^{(k)} = \xi_p^{(k)} + \frac{d\xi}{dt}(\Delta t^{(k)} - \Delta t^{(k-1)}) \tag{7}$$

ここで$\xi_p^{(k)}$は補正前の値である。多くの対称型公式は陰的公式であり、時間刻みを変えなくても反復を必要とする。上の方法で時間刻みを収束させた場合には通常時間刻みを変えても変えない場合と同程度の速さで収束する。すなわち時間刻み対称化のための計算コストは事実上ゼロであると考えられる。

なお、時間刻みの対称化の精度はどの程度が必要かについて簡単にふれておきたい。大雑把にいって、時間刻みの収束値からの相対誤差が ϵの程度であったとすれば、1 周期当たりの累積誤差 (例えばエネルギーの) が通常の対称化しない場合に対してファクターϵ程度小さくなることが期待できる。従って、例えばケプラー問題の場合なら、離心率が極端に大きくない限り n 周期積分するとすれば $\epsilon \sim 1/n$ ととれば実用上は十分と考えられる。

4 数値実験

この節では、数値実験の結果を示す。扱ったのはケプラー問題であり、積分公式はリープフロッグと 4 次のエルミート公式の 2 つである。図 2 に $e = 0.9$ の場合をリープフロッグで積分した結果を示す。図 1 の対称化していない場合と違い、軌道長半径が一周期で元の値に戻っていることがわかる。他の軌道要素のうち離心率も永年誤差がなくなっている。 近日点通過時刻と近日点経度は時間 1 次でずれる。近日点通過時刻は通常の積分公式 (シンプレクテックでも対称型でもないもの) では時間 2 次でずれるものであり、時間刻み対称化によって時間刻み可変でも時間刻み一定のシンプレクテックや対称型公式と同じような良い性質が回復されていることがわかる。図 3 は同じ問題を 1000 周期積分したもの、図 4 は $e = 0.999$ の場合を 4 次のエルミート公式で積分したものである。いずれの場合でも永年誤差がなくなっていることがわかる。より詳しくは Hut et al. (1995) を参照してほしい。ここではケプラー運動の場合の結果のみを示すが、3 体問題でも同様な精度の改善がみられた。

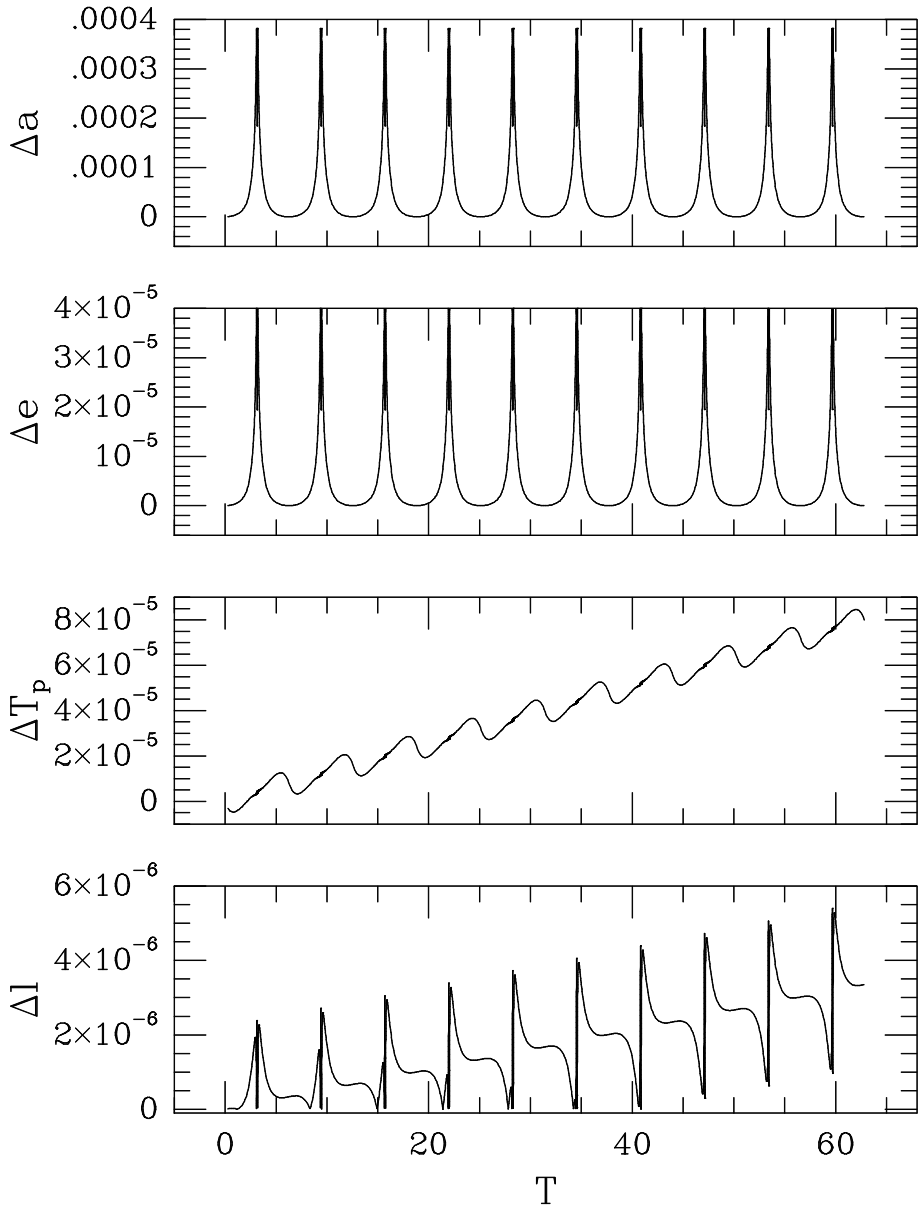

図 2: Variation of the orbital elements integrated by symmetrized variable-stepsize leapfrog integrator. Initial condition is same as that in figure 1. Four panels show the semi-major access (top), eccentricity (second), the time of periastron passage (third) and the longitude of pericenter (bottom).

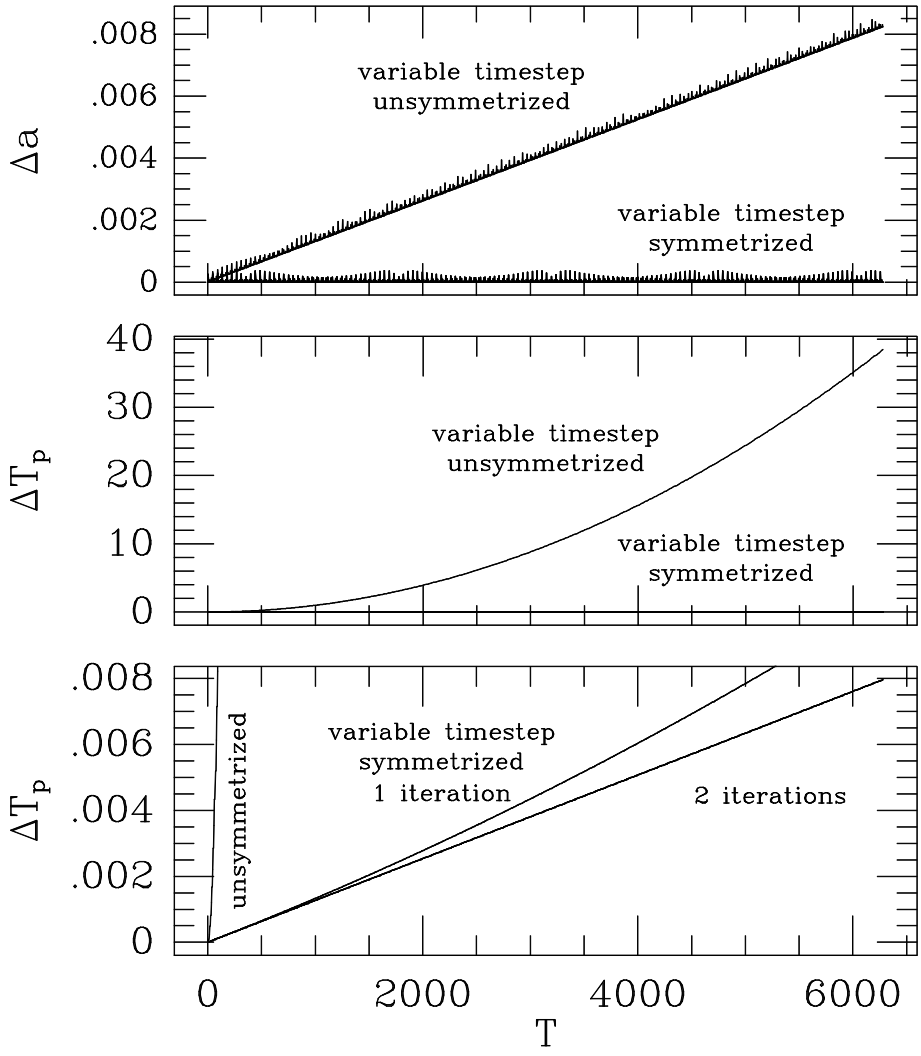

図 3: Same as figure 2 but for 1000 orbits. Only the semi-major axis and the time of periastron passage are shown. The middle and lowermost panels show the same quantities but in different scales.

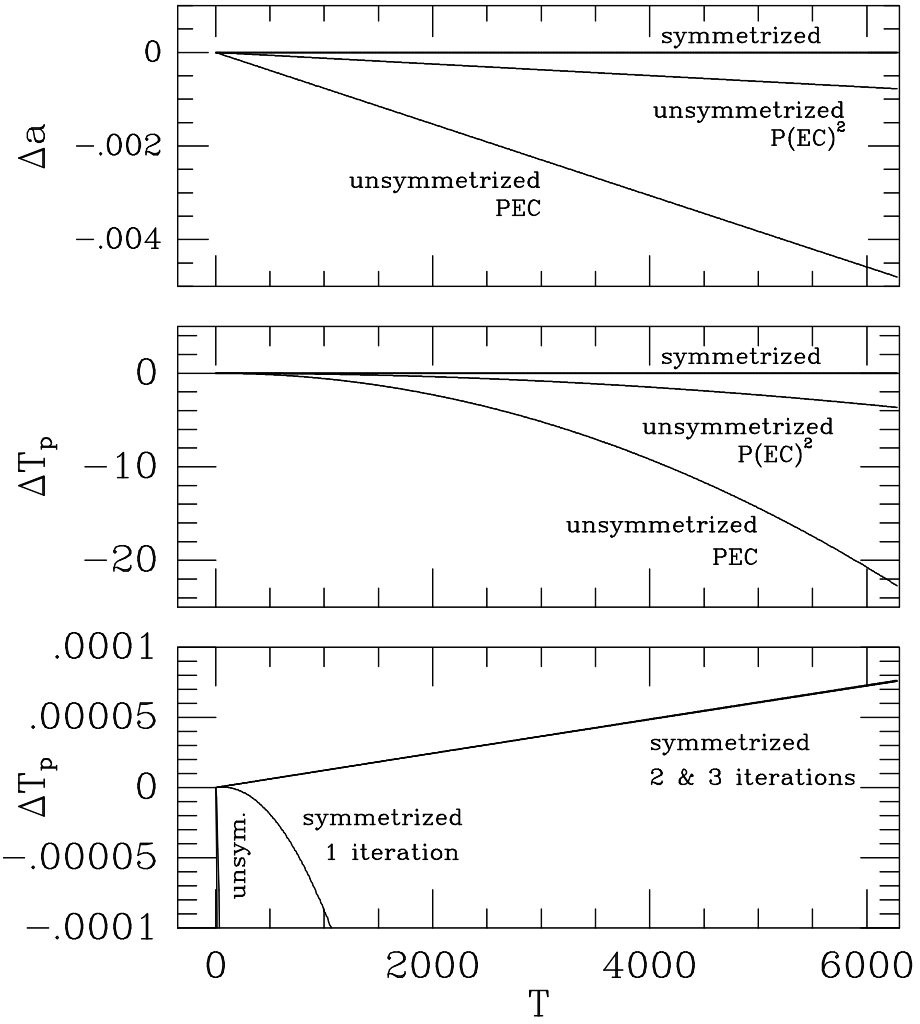

図 4: Same as figure 3 but for eccentricity $e = 0.999$ integrated with 4th-order Hermite scheme.

5　ディスカッション

5.1　理論的解析について

Cano と Sanz-Serna(1995) は、周期運動するハミルトン系について、(a) 時間刻み一定のシンプレクテック公式, (b) 時間ステップ対称化した対称型公式、(c) ハミルトニアンを保存するように構成された公式の 3 つについて、任意の量の誤差が最大でも時間の 1 次でしか増大しないということを証明した。これは時間刻み対称化にある程度の理論的裏付けを与えるものと解釈できよう。しかし、注意するべきことは、彼らが示したのは任意の量の誤差が時間の 1 次でしか増大しないということだけで、保存量に永年誤差がないということではないということである。実際、ハミルトニアンを保存するように構成された公式をケプラー問題に適用した場合、軌道長半径はもちろん保存するが角運動量は保存しなくなる (時間に比例する誤差がでる) ということは従来から知られている。天文学での応用を考えた場合、角運動量が保存することはエネルギーが保存することと同程度には重要であり、対称型公式の振舞いにはまだ理論的解析の余地があるといえよう。

5.2　Individual timestep

多くの天文学上の多体シミュレーションでは、粒子によってタイムスケールが大きくことなり、そのために粒子毎に時間刻みを変える Individual timestep (独立時間刻み) 法を使うのが普通である。この方法と時間刻み対称化を併用することは一般には困難である。なぜなら、粒子によって時間刻みが違うと、対称型の公式でも系全体としては時間反転できなくなるからである。

今、2 個の粒子 1 と 2 を考え、 1 は 2 の 2 倍の時間刻みを持っていたとしよう。(図 5) まず粒子 2 を動かす。例えばエルミート公式を使っていたとすれば、時刻 t_1 で粒子 1 から粒子 2 への力を計算する必要がある。そのためには、時刻 t_0 から外挿 (予測) して粒子 1 の位置を求め、そこから力を計算する。さて、今時刻 t_2 から逆に戻る場合を考えると、まず粒子 2 を時刻 t_1 まで戻すわけだが、ここでやはり粒子 1 からの力を計算する必要がある。このためには、粒子 1 の位置を時刻 t_2 から外挿することになる。この時に計算される粒子 1 の座標は、最初に時間を進める時に求まったものとは同じではない。これは予測子は未来の情報を使うわけにはいかないからである。

Lake et al. (1995) は、リープフロッグは対称化した上で独立時間刻みを使うことが可能であることを示した。これは、基本的にはリープフロッグが陽公式であり、位置は予測子が修正されないでそのまま使われるためである。なお、速度は修正子によって修正される。従って、対称性を保証するためには、時間刻みが速度ではなく位置だけに依存するようになっている必要がある。彼らは時間刻みを $\sqrt{G\rho}$ に比例させることで速度に依存しない時間刻みを作っている。

リープフロッグより高次のスキームと独立時間刻みを組み合わせるのはより困難である。まず、独立時間刻みを使えるためには、任意の時刻で任意の粒子の位置を積分公式の次数と矛盾しない精度で予測できる必要がある。ルンゲ・クッタのような一段法ではこれは不可能であり、高次精度にするためには線形多段階法を使う必要がある。さらに、上で述べた予測子の非対称性を解消するためには、予測子が次の時刻からの情報も使っていなければならない。

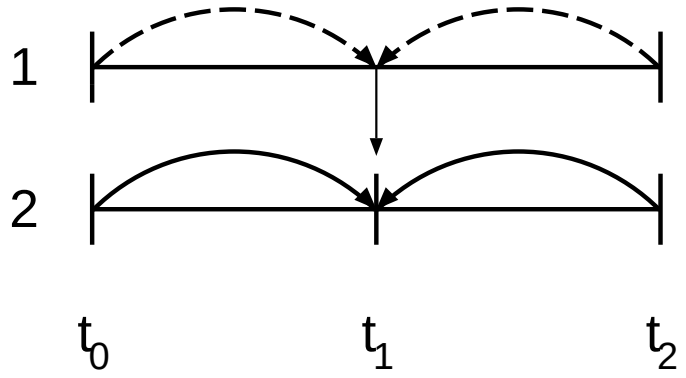

図 5: Problems with individual timestep scheme. When we integrate particle 2 from t_0 to t_1, the position of particle 1 is predicted from that at t_0. When we integrate particle 2 from t_2 back to t_1, particle 1 must also "predicted" backword from t_2. Thus the predicted position of particle 1 will be different for forward and backward integration.

以下、1 段法ではあるが陽公式ではない場合、例えば 4 次のエルミート公式について、予測子を対称化する可能性について述べる。ある粒子の予測子を対称化するには、その粒子の次のステップでの位置、速度がわかっていればいい。このためには、原理的には複数の時間ステップを一度に収束させればよい。上の粒子 2 個の例で考えると、最初は時刻 t_2まで全体を普通に積分する。これで求まった値を使って、粒子 1 の軌道の対称化した予測子を構成することができる。これを使ってもう一度 t_0 から t_2まで積分し、以下 t_2での答が収束するまで繰り返す。この方法にはいくつかの実際的な困難がある。まず実際のプログラミングがかなり大変である。中間点での値をすべて取っておいてそこから予測子を作る必要があるからである。また、最小の時間刻みと最大のものとの比があまりに大きいと、収束が遅くなる、あるいは収束しなくなる可能性がある。

実際に独立時間刻みを使って行なう必要があるのは、例えば球状星団の熱的タイムスケールでの進化のシミュレーションなどだが、このような場合にはさらに近接散乱や連星の扱いが問題になる。従来は KS 正則化をした上でエネルギー安定化をする積分法が使われていた。船渡ら (Funato 1995, Funato et al. 1995) は KS 正則化をした場合でも時間ステップ対称化は有効であり、エネルギー安定化が角運動量の永年誤差を生み出すのに対し対称化した場合はそのような問題はないことを示している。

5.3 まとめ

我々はハミルトン系用の対称型積分公式の時間刻みを永年誤差を出さないような形で変える方法を見い出した。この方法の本質は、時間刻み自体が対称であるようにする、すなわち、1 ステップの積分の始点で計算された時間刻みと、その終点から戻る時に使われる時間刻みが同じになることを保証するということである。このために時間刻みは陰的に決まることになり、反復によって収束させる必要がある。この反復回数は初期推定と反復方法で変わるが、少しの工夫で 2-3 回の反復で十分な精度がえられるようにすることができた。

参考文献

Calvo, M.P. and Sanz-Serna, J.M., SIAM J. Sci. Comput. 14, 936 (1993).
Calvo, M.P. and Sanz-Serna, J.M., Numerical Hamiltonian Problems, Chapman & Hall, London (1994).
Cano, B.P. and Sanz-Serna, J.M., preprint (1995).
Funato, Y. この集録 (1995).
Funato, Y, Makino, J., Hut, P., and McMillan, S., in preparation (1995).
Hut, P., Makino, J., and McMillan, S., to appear in APJL (1995).
Kinoshita, H., Yoshida, H., and Nakai, H., Celes. Mech. 50 59 (1991).
Lake, G., Katz, N., Quinn, T., and Stadel, J., in Priceedings of the 7th SIAM conference on Parallel Processing for Scientific Computing, eds. D.H. Bailey et al., SIAM, Philadelphia, p. 307 (1995).
Quinlan, G.D. and Tremaine, S., AJ 100 1694 (1990).