数値計算法の基礎

牧野淳一郎
東京大学理学系研究科天文学専攻

平成 17 年 1 月 25 日

大体の講義計画

- 常微分方程式の数値積分法の概要
- 独立時間刻みと関係する話題
- ハミルトン系に適した方法

あんまり時間がないので、詳しくは牧野の講義ノート

http://grape.astron.s.u-tokyo.ac.jp/pub/people/makino/kougi/stellar_dynamics/index.html
http://grape.astron.s.u-tokyo.ac.jp/pub/people/makino/talks/index-j.html

等を見てくださいな。

計算法

原理的には、多体シミュレーションはとっても単純：

運動方程式

$$\frac{d^2 \boldsymbol{x}_i}{dt^2} = \sum_{j \neq i} G m_j \frac{\boldsymbol{x}_j - \boldsymbol{x}_i}{|\boldsymbol{x}_j - \boldsymbol{x}_i|^3}, \tag{1}$$

を数値積分するだけ。

右辺を計算するプログラム： 2 重ループで 10 行くらい

時間積分： なにかルンゲクッタとか適当なものを使えばいい

というだけで話が済めばいいけれど、もちろん世の中はそんなに簡単ではない。

何が問題か？

- 計算精度の問題： 2 粒子の近接散乱、自己重力による構造形成 — 時間刻みをどんどん短くしないとちゃんと計算できなくなる。
  積分時間が長いので高精度の公式を使いたい。
- 計算量の問題： 右辺の計算量が $O(N^2)$ — N が少し大きくなるとすぐに計算時間が現実的ではなくなる

今日は、時間領域の話の基礎を。空間領域の話は川井さんがするはず。時間領域の高度な話は福重さん、台坂さんがするはず。

常微分方程式の数値解法の概要

算数としては、単に常微分方程式の初期値問題の数値解。まず、数値解法にはどういうものがあるかというのを概観しておく。

- ルンゲ・クッタ法
- 予測子・修正子法
- (外挿法)

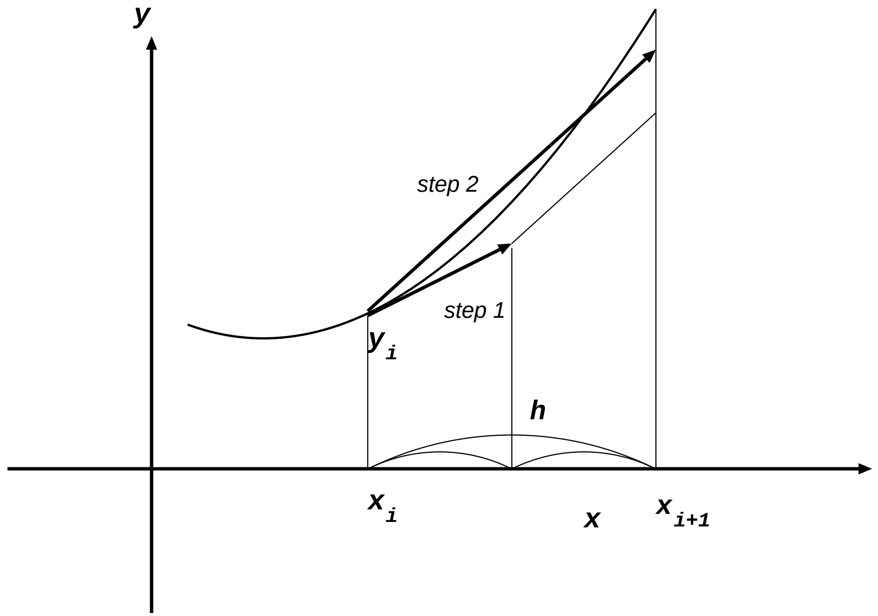
ルンゲ・クッタ

ルンゲ・クッタ法というのは、ある一般的な形に書ける公式のクラスであるが、ちょっとわかりにくいのでまず例から。

二次のルンゲ・クッタ法

以下のような計算法を考える

$$\begin{aligned} k_1 &= x_i + \frac{h}{2} f(x_i, t_i) \\ x_{i+1} &= x_i + h f(k_1, t_i + h/2) \end{aligned} \qquad (2)$$



これは2次精度(他にも2次精度の公式はある)。

ルンゲ・クッタの一般形

$$\begin{aligned} \boldsymbol{x}_{n+1} &= \boldsymbol{x}_n + h \sum_{i=1}^{s} b_i \boldsymbol{k}_i \\ \boldsymbol{k}_i &= \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}_n + h \sum_{j=1}^{s} a_{ij} \boldsymbol{k}_j, t_n + c_i h) \end{aligned} \tag{3}$$

s :段数（number of stages）という。

a_{ij}, b_i, c_i はパラメータ

a と c は普通

$$c_i = \sum_{j=1}^{s} a_{ij} \tag{4}$$

となるようにとる。

2段の公式

$s = 2$ の場合に書き下してみると

$$\begin{aligned} x_{n+1} &= x_n + h(k_1 b_1 + k_2 b_2) \\ k_1 &= f(x_n + h(a_{11}k_1 + a_{12}k_2), t_n + c_1 h) \\ k_2 &= f(x_n + h(a_{21}k_1 + a_{22}k_2), t_n + c_2 h) \end{aligned} \tag{5}$$

と、まあ、こんな感じ。

- $a_{ij} \quad (j \geq i)$ がすべて 0 ならば、k_1 から順に計算していくことができる。つまり、「陽的」公式になっている。
- $a_{ij} \quad (j > i)$ が 0 のときは、各 k_i についての式に k_i だけが入ってくる。これを半陰的 (semi-implicit) 公式という。この場合には、まず k_1 についての方程式をといて、次に k_2 についてのを解いて、、、と順番に計算出来る。

陰公式

- 制約が全くない時は、「陰的」公式ということになる。このときは、すべての k_i に対する（一般には非線形な）方程式を一度に解く必要がある。

なぜ陰的公式といった面倒なものをつくるかというのはよくわからないかもしれない。これについてはあとで説明するとして、まず、陽的公式の例について述べる。

古典的 Runge-Kutta法

陽的ルンゲ・クッタ法のなかでもっとも広く使われているのが「古典的」といわれる公式である。書き下すと、

$$
\begin{aligned}
x_{n+1} &= x_n + h(k_1/6 + k_2/3 + k_3/3 + k_4/6) \\
k_1 &= f(x_n, t_n) \\
k_2 &= f(x_n + hk_1/2, t_n + h/2) \\
k_3 &= f(x_n + hk_2/2, t_n + h/2) \\
k_4 &= f(x_n + hk_3, t_n + h)
\end{aligned} \tag{6}
$$

というものである。これは、いろいろ良い性質をもつ。

古典的 Runge-Kutta 法の特長

1. a_{ij} が $i-j=1$ 以外すべて 0 なので、右辺の計算が楽である。
2. 次数が 4 次であり、4 段陽的公式で到達可能な最高次数を達成している
3. 係数が簡単な有理数なので、プログラムしやすい。また丸め誤差を小さくできる。

この公式が 4 次であることを示すのは、それほど簡単ではない。腕力に自信があるひとは挑戦してみて欲しい。

陽公式の到達可能次数

理論的、あるいは実用上重要なのは、段数を決めた時に、次数がいくつまで可能かということである。が、これは一般の場合には未解決であり、以下の結果しかわかっていない

s	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	$s \geq 10$
p	1	2	3	4	4	5	6	6	7	7	$p \leq s-2$

ある段数で、到達可能な最高次数を達成する公式というのは一通りではない。2 段 2 次の場合でも、自由パラメータが一つあって「無限個」の公式があり得るわけである。段数が増えれば自由パラメータの数も増える。

どういう公式がいいか？

それではどういう公式を使うべきかというのは、精力的な研究が行なわれてきた。問題にもよるが、例えば

1. 局所離散化誤差の係数が小さい
2. 係数の数字が簡単な有理数になる
3. 係数に 0 が多い

というようなことはそれぞれ実用的には重要である。

Dormand と Prince は、段数／次数のさまざまな組合せについて、局所離散化誤差を非常に小さくした公式を求めた。

`http://www.unige.ch/math/folks/hairer/software.html`

から入手できる (Fotran と C がある)。

刻み幅調節

ある精度で計算したい: 要求精度に応じて刻み幅を変える必要あり

計算時間の無駄を減らす: 局所誤差が小さい（解が滑らかな）ところは刻みを大きく、逆に解が急にかわるところでは刻みを小さくする。

可変刻み (variable step) / 適応刻み (adaptive step)

どうやって刻み h を変えるか = どうやって誤差を推定するか

埋め込み型公式

RK 型の公式

$$x_{n+1} = x_n + \sum_{i=1}^{s} b_i k_i \tag{7}$$

k_i は全部そのまま使って、 b_i を別の b'_i に置き換える

$$x' = x_n + \sum_{i=1}^{s} b'_i k_i \tag{8}$$

x' が局所離散化誤差が元の公式よりも大きいが、むやみと大きくはない（例えば、一次次数が低い）なら、元の公式との差を誤差の推定に使うことができる。

この形の公式のことを埋め込み型 embedded 公式という。最初に提案した人の名前をとって Runge-Kutta-Fehlberg 公式ということも多い。Dormand-Prince はこの形である。

陰的ルンゲクッタ公式

陰的公式は、(理論的には) 素晴らしい性質をもつ。

「s 段陰的公式の到達可能次数は $2s$ である。」

これのため、いくらでも次数の高い公式をつくることができる。陽的な場合には 8 次よりも高次のものはほとんど知られていないのとは対照的である。

これは単なる存在証明ではなく、実際に $2s$ 次の公式が構築されている。これは実はユニークに決まり、「陰的ガウス公式」と呼ばれるものがそれ。

詳しい話は省略。

線形多段階法

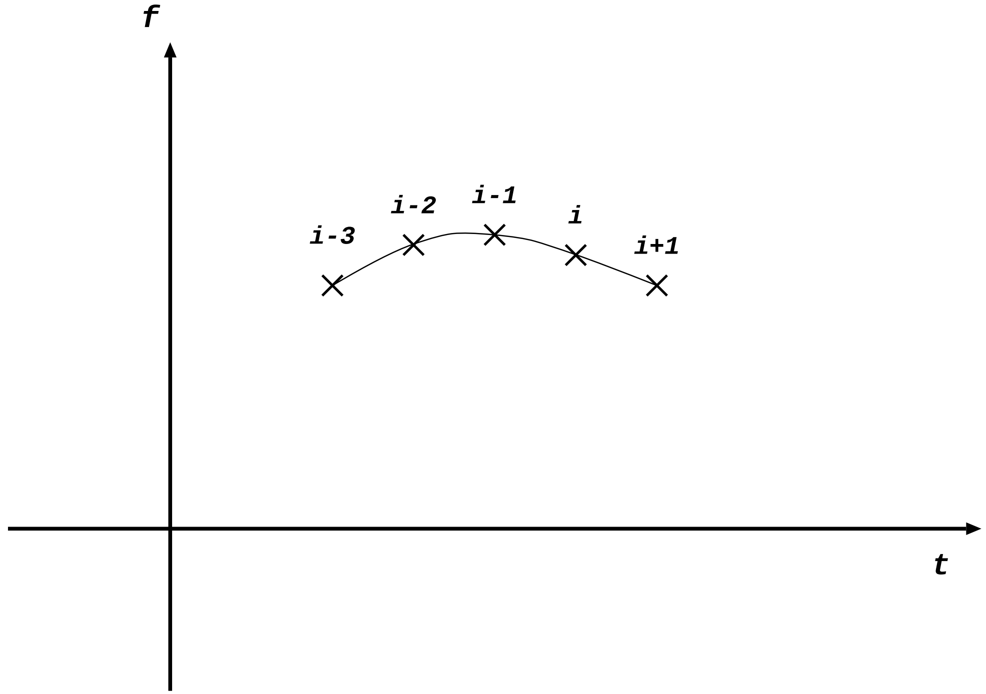
ルンゲ・クッタ法:「一段階法」t_i における解 x_i がわかっていれば、それだけから次の時刻 t_{i+1} での解 x_{i+1} が求まる。

多段法: t_i での情報だけでなく、その前のステップでの情報（導関数の値や解そのものの値）を記憶しておいて、それを使う。

これにより、余計な計算をしないで計算精度をあげたい。

アダムス法

原理: いくつかのステップでの導関数（微分方程式の右辺） f の値を憶えておいて、それを通る補間多項式を作り、それを積分して解を求める。



左の図に概念を示す。ここでは、積分公式の時と同様にラグランジュ補間（ニュートン補間）をして多項式を作る。で、その作った多項式を積分する。

アダムス法の実際

例えば、点 i から $i+1$ まで積分するのに、点 $i-p$ から i までの関数値を使うとすれば、p 次の多項式で

$$P(t_j) = f_j = f(x_j, t_j) \quad (i - p \le j \le i) \tag{9}$$

を満たすものを作る。で、$i+1$ での解 x_{i+1} は

$$x_{i+1} = x_i + \int_{t_i}^{t_{i+1}} P(t) dt \tag{10}$$

で与えられる。刻み h が定数であるとすれば、p を決めれば上の式を

$$x_{i+1} = x_i + h \sum_{l=0}^{p} a_{pj} f_{i-l} \tag{11}$$

の形に書き直せる。

2 次の公式

簡単な例として、$p = 1$ の場合を考えてみよう。この時、補間多項式は一次であって

$$P(t) = f_i - \frac{f_{i-1} - f_i}{h}(t - t_i) \tag{12}$$

となって、これを積分すれば、結局

$$x_{i+1} = x_i + \frac{h}{2}(3f_i - f_{i-1}) \tag{13}$$

となる。

一般に、アダムス法では任意段数の公式が構成でき、その次数は段数に等しいことがわかっている。これは、ルンゲ・クッタなどに比べればはるかによい性質をもっているということでもある。

陰的アダムス法

陰的な補間多項式、つまり t_{i+1} での関数の値を使った公式を考える。

刻み h が定数であるとすれば、p を決めれば前と同様に

$$x_{i+1} = x_i + h \sum_{l=-1}^{p-1} b_{pj} f_{i-l} \tag{14}$$

の形に書けることになる。また手をぬいて $p = 1$ の場合を考えれば、これは単に台形公式

$$x_{i+1} = x_i + \frac{h}{2}(f_i + f_{i+1}) \tag{15}$$

となる。

代数方程式の解きかた

通常の方法

- 初期値として同じ次数の陽的アダムス法の解を持ちいる。
- そのあとは直接代入法で反復する。

というものである。

なお、このやり方を、予測子・修正子法と呼ぶ。線形多段階法はほとんどこの形で使われるため、線形多段階法のことをさして予測子・修正子法と呼ぶ人もいる。

反復回数

収束まで繰り返す必要はないことに注意。

例えば、予測-加速度計算-修正 (PEC) とするだけでも、予測-加速度計算 (PE) だけよりも精度が上がる。それ以上反復を繰り返しても大して精度は上がらない。

場合によっては $\mathrm{P(EC)^2}$ や $\mathrm{PE(CE)^2}$ といった方法も使われる。

出発公式

アダムス法はいくらでも高次の公式が作れ、計算量もあまり多くないということがわかっているが、必ずしも広く使われているというわけでもない。その理由はいろいろあるが、一つは、

「どうやって計算を始めるべきかよくわからない」

ということ。

初期値問題としてはもちろん t_0 における x_0 しか知らない

多段階法ではその前の時刻での解が必要

なんらかの方法で与える:面倒

低い次数から始める: 時間刻み変える必要あり:やっぱり面倒

時間刻みを変える時

時間刻み一定:あらかじめ係数を求めておいて、前の関数値の線形結合で計算できる。

刻みを変えたい場合:

もっとも一般的で強力な方法は、補間多項式を計算し、さらにそれを現在の時間刻みで積分した形の係数を求める、すなわち、毎回積分公式を作り直すという方法。

大変そうに聞こえるけど面倒なだけで難しいわけではない。細かい話は省略。

計算中の誤差評価

誤差評価はルンゲ・クッタに比べて容易。

予測子・修正子型の公式の場合、この 2 つの間の差がかなり良い誤差の推定値（もちろん大きめだが）になっているので、これを使ってやればいい。

ルンゲ・クッタとの比較

必要な精度を決めた時、ほとんどどんな場合でも、線形多段階法のほうがルンゲ・クッタ法よりも少ない計算量で答を得ることが出来る

(実験的にも、また誤差の係数をつかった理論的な解析からも)

ルンゲ・クッタ公式が優れているのは、基本的にはその使いやすさにおいてのみ

使いやすさというのは実際的にはなかなか重要

2 階の方程式向けの方法

ハミルトン系のような 2 階の方程式の場合:

アダムス型公式をそのまま使うのは賢くない

アダムス法の場合、加速度に対する補間多項式を 2 回積分すれば位置の変化が求まる。

速度についての補間多項式を構成したり、速度の昔の情報をとっておく必要はない。

必要なメモリ、計算量の両方が減る。

大体の講義計画

- 常微分方程式の数値積分法の概要
- 独立時間刻みと関係する話題
  - なぜそういうものを考えるか
  - 原理
- ハミルトン系に適した方法

独立時間刻み

重力多体問題: 原理的には単に大規模な常微分方程式の初期値問題

ナイーブに考えると、今まで議論してきたいろんな公式がライブラリであるので、それを使えば済みそうな気がする。

でも、実際にはなかなかそうはいかない

済まない理由:

- 粒子によって非常に大きく軌道のタイムスケールが違うことがある
- 連星とかそういったものができる
- (プログラムの構成上使うのが難しい)

軌道タイムスケールの問題

- 構造形成による効果
- 一様な系でも起きる問題

構造形成による効果

自己相似的なコラプス:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\rho} &\propto \boldsymbol{r}^{-\boldsymbol{\alpha}} \\ \boldsymbol{\sigma} &\propto \boldsymbol{r}^{(2-\boldsymbol{\alpha})/2} \end{aligned} \tag{16}$$

軌道タイムスケール: $1/\sqrt{G\rho} \sim r^{\alpha/2}$

コアが収縮するにつれてその力学的タイムスケールはどんどん短くなる。

一様な系でも起きる問題

重力が引力であるために確率的には 2 つの粒子がひじょうに近付くような近接散乱が起こる

インパクトパラメータが 0 に近い 2 体衝突: 非常に短い時間刻みが必要

これは重力多体系特有の問題: 相互作用が引力で、しかも距離 0 で発散するため。

例えば分子動力学計算ではこういう問題はおこらない。

計算量への影響

単純な可変時間刻みでは計算量が大きくなる。

理由:

どちらの場合も、タイムステップの分布がべき乗的なテイルをもつようになる。

このため、粒子数が増えるに従って、タイムステップが短くなる。

構造形成の効果: 最悪 $O(N)$

2 体衝突の効果: $O(N^{1/3})$ 程度

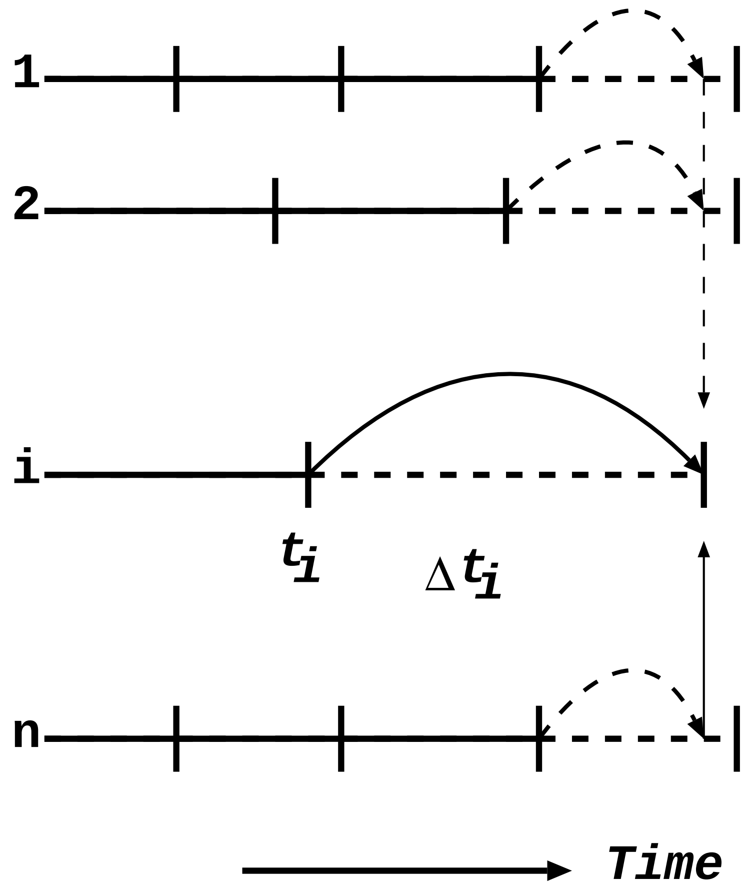
対応

- 粒子毎に時間刻みをバラバラに変化させる。(独立時間刻み)
- 2 体衝突、連星は座標変換して扱う。

独立時間刻みの原理

粒子毎にばらばらの時刻 t_i と時間ステップ Δt_i を与える

1. $t_i + \Delta t_i$ が最小の粒子を選ぶ。
2. その粒子の軌道を新しい時刻まで積分する。
3. その粒子の新しい時間刻みを決める。
4. ステップ 1 に戻る。



問題:ある粒子の時刻 $t_i + \Delta t_i$ で他の粒子の位置が必要

他の粒子の位置の計算

時間刻み可変の「予測子」を使えば問題ない

つまり、

- 各粒子の時間積分公式としては、可変ステップの線形多段階法を PEC モードで使う。
- ある粒子の新しい時刻での加速度を計算するには、他の粒子のその時刻での位置を予測子を使って予測する。

ということになる。

時間刻み自体の決定

伝統的には、以下のなんだか意味が良くわからない形の式が使われている。

$$\boldsymbol{\Delta} \boldsymbol{t} = \sqrt{\boldsymbol{\eta} \frac{|\boldsymbol{a}_1||\mathbf{a}_1^{(2)}| + |\dot{\mathbf{a}}_1|^2}{|\dot{\mathbf{a}}_1||\mathbf{a}_1^{(3)}| + |\mathbf{a}_1^{(2)}|^2}} \tag{17}$$

時と場合に応じて考える必要あり。

大体の講義計画

- 常微分方程式の数値積分法の概要
- 独立時間刻みと関係する話題
- ハミルトン系に適した方法
  - なぜそういうものを考えるか
  - 良い公式の例: リープフロッグ
  - シンプレクティック公式
    - 陽公式の構成
    - 陰公式
    - 可変時間刻み
  - 対称型公式

ハミルトン系に適した公式はないか？

連星、階層 3 重星のような長時間積分が必要な系: 特殊な公式を使ってでも計算時間を短くしたい。そういうものはないか?

- シンプレクティック型公式
- 対称型公式

ハミルトン系/周期軌道に対して特別に良い性質をもつ

「良い」公式の古典: 2 次 leap frog

昔からいろんな業界で使われていて、名前が違う、、、

- leapfrog
- Verlet
- 2nd order ABM
- 2nd order Stömer-Cowell

他にも 4 個くらい名前があったような。

leap frog 公式

$$v_{i+1/2} = v_{i-1/2} + \Delta t a(x_i) \tag{18}$$
$$x_{i+1} = x_i + \Delta t v_{i+1/2} \tag{19}$$

ここで、添字はステップである。 $\pm 1/2$ は中間点での値ということになる。

出発用公式として

$$v_{1/2} = v + \Delta t a(x_0)/2 \tag{20}$$

を使い、さらに終了用公式として

$$v_i = v_{i-1/2} + \Delta t a(x_i)/2 \tag{21}$$

を使う

別の表現

$$\begin{aligned} \boldsymbol{x}_{i+1} &= \boldsymbol{x}_i + \boldsymbol{\Delta t v}_i + \boldsymbol{\Delta t}^2 \boldsymbol{a}(\boldsymbol{x}_i)/\boldsymbol{2} & (22) \\ \boldsymbol{v}_{i+1} &= \boldsymbol{v}_i + \boldsymbol{\Delta t}[\boldsymbol{a}(\boldsymbol{x}_i) + \boldsymbol{a}(\boldsymbol{x}_{i+1})]/\boldsymbol{2} & (23) \end{aligned}$$

こう書くと PC 法みたいに見える。また、以下のようにも書ける

$$\begin{aligned} \boldsymbol{v}_{i+1/2} &= \boldsymbol{v}_i + \boldsymbol{\Delta t a}(\boldsymbol{x}_i)/\boldsymbol{2} & (24) \\ \boldsymbol{x}_{i+1} &= \boldsymbol{x}_i + \boldsymbol{\Delta t v}_{i+1/2} & (25) \\ \boldsymbol{v}_{i+1} &= \boldsymbol{v}_{i+1/2} + \boldsymbol{\Delta t a}(\boldsymbol{x}_{i+1})/\boldsymbol{2} & (26) \end{aligned}$$

これは一見なんだか良くわからない。さらにまた、速度を消去して $\boldsymbol{x}_{i-1}$, $\boldsymbol{x}_i$, $\boldsymbol{x}_{i+1}$ の関係式の形で書いてあることもあるかもしれない。

leap frog の性質

普通にいう 2 次精度である。

局所誤差という観点からはこれは決して良い公式というわけではないが、現実にはこの公式は非常に広く使われている。

理由:非常に「良い」性質を持つ。例えばエネルギーや角運動量のような保存量が非常によく保存するということである。これらの保存量については多くの場合に誤差がある程度以上増えない。

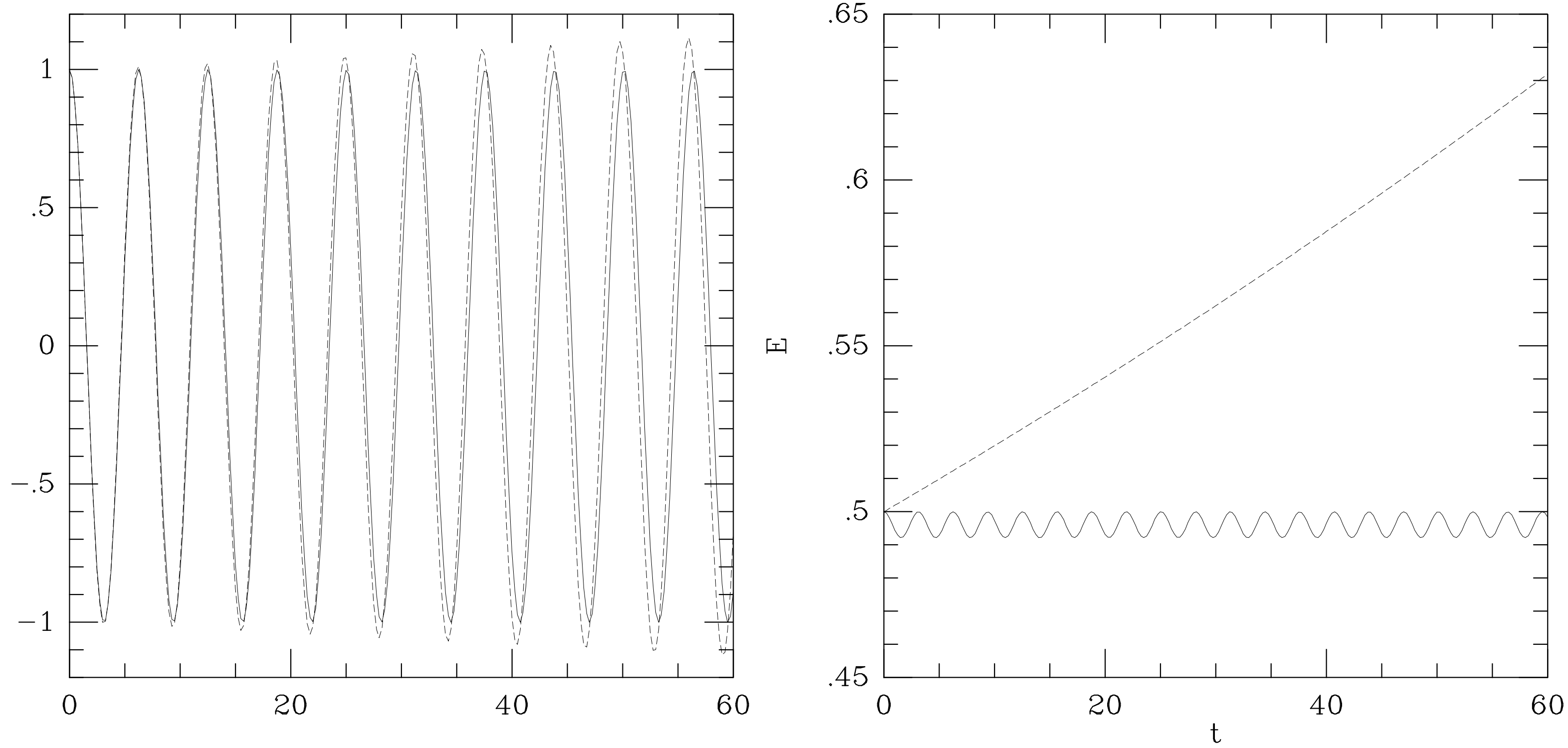
数値例

調和振動子

$$\frac{d^2x}{dt^2} = -x \tag{27}$$

を リープフロッグ と 2 階のルンゲクッタで解いてみる。初期条件は $(x, v) = (1, 0)$ で、時間刻みは $1/4$ である。

軌道とエネルギー



保存量

この調和振動子の場合には、リープフロッグ公式は以下の量

$$H' = \frac{1}{2}(x^2 + v^2) - \frac{h^2}{4}x^2 \tag{28}$$

を保存する。

つまり、微妙に浅いポテンシャルでの調和振動子になっている。

$h \geq 2$ になるとポテンシャルが下に凸でなくなる。

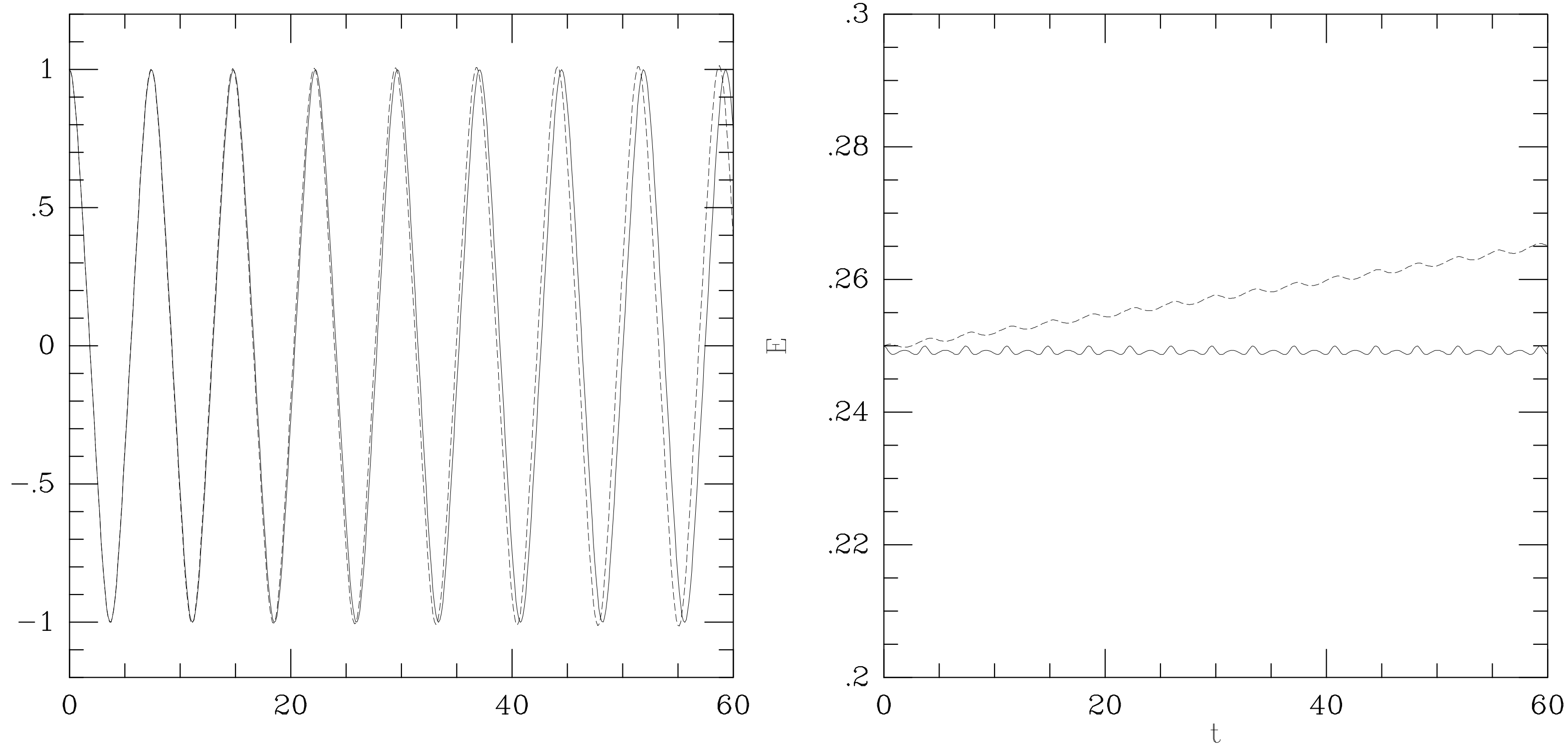
これは、安定でなくなる (差分方程式の固有の絶対値が 1 でなくなる) のと一致している。

非線形振動

$$\frac{d^2x}{dt^2} = -x^3 \tag{29}$$

をリープフロッグと 2 階のルンゲクッタで解いてみる。初期条件は $(x, v) = (1, 0)$ で、時間刻みは $1/8$ である。

軌道とエネルギー



何故良いか？

1. リープフロッグはシンプレクティック公式 のもっとも簡単なものの一つである。
2. リープフロッグは対称型公式 のもっとも簡単なものの一つである。

シンプレクティック公式の性質

1. シンプレクティック公式は、すくなくともある種のハミルトニアンに対して使った場合に、それに近い別のハミルトン系に対する厳密解を与えることがある。
2. 周期解を持つハミルトン系に対して使った場合に、どんな量でも誤差が最悪で時間に比例してしか増えない。
3. 時間刻を変えると上のようなことは成り立たなくなる

対称型公式の性質

1. 周期解を持つ時間対称な系に対して使った場合に、どんな量でも誤差が最悪で時間に比例してしか増えない。

2. 時間刻を変えてもうまくいくようにすることも出来る。

シンプレクティック公式

リープフロッグ 公式は、良いけど低次。

もっと高次の方法は?

そういうのを作る一つのアプローチ:シンプレクティック公式

シンプレクティック写像:要するに正準変換

リープフロッグ公式はシンプレクティック性を満たしている

これを時間刻みを変えて組合せたものもシンプレクティック性を満たしている

陽解法

吉田や鈴木による作用素分解に基づく公式が良く知られていて、広く使われている。

これらの方法の原理:

- リープフロッグをタイムステップを変えていくつか組合わせる。
- うまくタイムステップを組み合わせると誤差の高次の項を消すことができる

7 段 6 次や 15 段 8 次の公式等が吉田によって導かれている。

陽解法はハミルトニアンが $T(p)+V(q)$ の形の場合にしか使えない

陰解法

遠い昔にでてきた陰的ガウスはシンプレクティック。これはいろんな意味で「最適」な公式なので、それ以外の公式を考える意味はあんまりない。

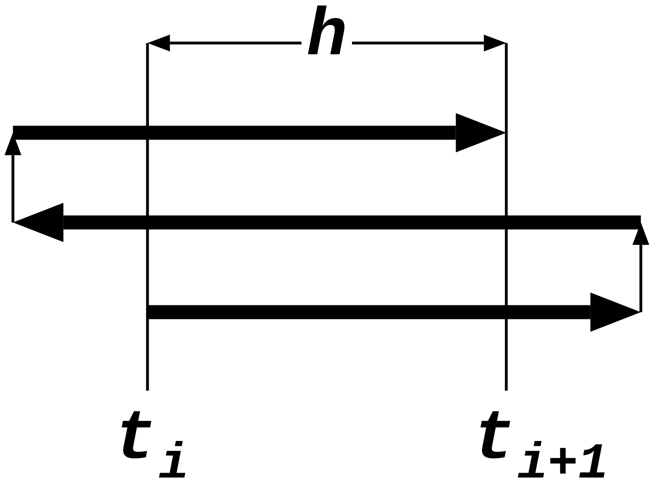
高次の陽的公式

Ruth による4次公式

$$\begin{aligned} S_4(h) &= L(d_1 h)L(d_2 h)L(d_1 h), \\ d_1 &= 1/(2-2^{1/3}), \\ d_2 &= 1-2d_1 = -2^{1/3}/(2-2^{1/3}) \end{aligned} \tag{30}$$

意味: $L(h)$ **がステップ** h **のリープフロッグで** 1 **ステップだけ積分**

4 次公式の意味



戻る量がちょうど進む量の $2^{1/3}$ 倍になっている

行きの 2 回の誤差 (の主要項) が戻る一回の誤差とキャンセルする。

これを繰り返していくらでも高次の公式を作れる。(段数は多くなる)

6 次公式

前ページの 再帰的な方法だと 6 次で 9 段、8 次で 27 段。ちょっと多すぎる。

少ないステージ数で高次の誤差項を一度に消すこともできないことはない。

吉田さんによる 6 次公式:

$$
\begin{aligned}
d_1 = d_7 &= 0.784513610477560 \\
d_2 = d_6 &= 0.235573213359357 \\
d_3 = d_5 &= -1.17767998417887 \\
d_4 &= 1.31518632068391
\end{aligned}
\tag{31}
$$

シンプレクティック公式の意味

シンプレクティックであるということと、「良い」ということの間の関係はなにか?

あるハミルトニアン H で表される系をシンプレクティックな p 次の公式を使って積分した解は、別のハミルトニアン H' で与えられるシステムの厳密解になっていて、H と H' の間に

$$H = H' + h^{p+1}H_p + O(h^{p+2}) \tag{32}$$

という関係がある（H' を求める数列が収束すれば）ということがわかっている。(吉田さんの研究)

(収束するかどうかは一般には明らかではない)

シンプレクティック公式と可変時間刻み

適当に時間刻みを変えると上手く働いてくれない (エネルギーとか保存しなくなる)

以下のような考えかたでの研究が進められている。ハミルトニアン H を

$$H = H_1 + H_2 + \cdots \tag{33}$$

と複数の項の和にわけ、それぞれについて違う時間刻みを与えることで実効的に時間刻みを変える。

局所誤差

シンプレクティック公式は1段法:局所誤差に対する計算量という観点からは線形多段階法に比べて必ず悪い

普通の(誤差を小さくした)ルンゲ・クッタに比べても驚くほど悪い

例:8 次の公式

15段の吉田による公式の誤差の係数は、2階の問題に最適化された非シンプレクティックな Dormand らによる9段公式（実質 8 段 8 次）の10^4 倍

同じ計算時間での局所誤差は100万倍

局所誤差の小さい公式

陰的ガウスはいろいろな意味で「最適」な公式であり、局所誤差も極めて小さい。

直接代入で収束させせても、他の方法より速いという実験結果もある。

MVS 公式等

「ハミルトニアンの分離」の考え方を、主要なハミルトニアン$+$摂動の系 (例えば摂動があるケプラー問題) に適用する。

リープフロッグの基本的な考え:

$$\boldsymbol{H = T(p) + V(q)} \tag{34}$$

に対して、p に対する以下の変換

$$\boldsymbol{p \leftarrow p - \Delta t \frac{\partial H}{\partial q}} \tag{35}$$

と q に対する同様な変換がそれぞれシンプレクティックなので、それらを順番に適用したものもシンプレクティックになるというもの。

摂動ケプラー問題

摂動をうけたケプラー問題のハミルトニアン:

$$H = T(p) + V_1(q) + V_2(q) \tag{36}$$

惑星系なら V_1 が太陽からの重力で、 V_2 は自分以外の惑星からの寄与。

このとき

$$H_1 = T(p) + V_1(q) \tag{37}$$

の解はそれ自体シンプレクティックであり、また V_2 だけを考えた

$$p \leftarrow p - \Delta t \frac{\partial V_2}{\partial q} \tag{38}$$

というマッピングもシンプレクティックである。従って、この 2 つを組み合わせて積分公式をつくることができる。

解釈

リープフロッグ: $x \leftarrow x + \Delta tv$ と直線で動かす

MVS: ポテンシャル V_1 に沿って動かす

ケプラー問題は解析的に解けるので、このようなやり方で太陽中心の軌道を極めて高精度に積分できる。

実用的にこの方法を使うためには、ケプラー問題を高速に解く方法が必要になる。これは、実空間でまともに解く方法と、KS 変換した座標系で解く方法のそれぞれで極めて高速に解ける方法が提案されている。

対称型公式

(ここでの) 時間反転に対する対称性とは、常微分方程式

$$\frac{dy}{dx} = f(x, y) \tag{39}$$

に対する一段法

$$y_{i+1} = F(x_i, y_i, f, \Delta x) \tag{40}$$

が、

$$y_i = F(x_{i+1}, y_{i+1}, -f, \Delta x) \tag{41}$$

を満たすこと、つまり、直観的には、ある微分方程式系があって、それを 1 ステップ分数値的に軌道を進めたとする。で、そこから逆に戻ると厳密に元の値に戻るということ。

具体例

前進オイラー法は対称型ではない。

その逆写像である後退オイラー法も対称型ではない。

台形公式

$$\boldsymbol{y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2}(f_i + f_{i+1})} \tag{42}$$

は対称。

対称形公式の利点

- ハミルトン系に対して対称型公式を使った場合、エネルギーや角運動量などの保存量の誤差がある範囲内にとどまる
- 時間刻みを変えても上の性質を保つことが出来る

前のほうの性質はシンプレクティック公式と同じであるが、後の方の性質はシンプレクティック公式よりもある意味でよいものである。

陰公式か陽公式か

一階の方程式に対する一段法という制限をつけた場合:対称な公式はかならず陰的公式

陰的ガウス法は対称型公式でもある。

一階の系に対する通常の一段法では、これよりよい方法は多分ない。それでは、

- ハミルトン系専用の解法ではどうだろうか
- 多段法ではどうなっているのだろう
- それ以外の方法はないのだろうか

以下、順番に考えていくことにする。

ハミルトン系用の陽的対称型RK公式

リープフロッグ公式は対称型でありしかも陽公式である。で、リープフロッグの組合わせで作られる公式も、実はすべて対称型になっている。

対称型線形多段法

一段法という枠を外してみる＝線型多段法を考える。

線形多段階法の対称性を以下のように定義しておく。

2 階の方程式用の線形多段階法の一般形:

$$\boldsymbol{\alpha}_0 \boldsymbol{x}_{i+p} + \cdots \boldsymbol{\alpha}_p \boldsymbol{x}_i = \boldsymbol{h}^2(\boldsymbol{\beta}_0 \boldsymbol{f}_{i+p} + \cdots \boldsymbol{\beta}_p \boldsymbol{f}_i) \tag{43}$$

$\beta_0 = 0$ なら陽的、そうでなければ陰的公式

対称型であるとは、係数が

$$\boldsymbol{\alpha}_i = \boldsymbol{\alpha}_{p-i}, \quad \boldsymbol{\beta}_i = \boldsymbol{\beta}_{p-i} \tag{44}$$

を満たすということ。

リープフロッグをこの形にしたものは、

$$\boldsymbol{x}_{i+1} - 2\boldsymbol{x}_i + \boldsymbol{x}_{i-1} = \boldsymbol{h}^2 \boldsymbol{f}_i \tag{45}$$

注意

係数が対称という意味で対称な公式は、実際に時間反転に対して対称といえる。

$(x_i, ...x_{i+p-1})$ から上の式で x_{i+p} を求めたとする。時間を逆転させせた解を考えて、$(x_{i+p}, ...x_{i+1})$ から x_i を求めるということを考えても、使う式が時間が逆転していないものと同じになっているのである。

歴史

公式が存在することは 1970 年代から知られていた

注目されるようになったのはシンプレクティック法の研究が盛んになった 1990 年代に入ってから。特にトロント大の Quinlan と Tremaine が 14 次までの対称型公式を導いた。

さらに最近になって、国立天文台の福島によって、Quinlan & Tremaine によるものよりもはるかに良い性質を持つものが導かれている。

問題点

これらの公式に共通する欠陥: 6 次以上の公式は線形解析では安定であっても、非線形問題（例えば、単純なケプラー問題）に適用すると共鳴により不安定な振動を起こす。

このために 6 次以上の公式は現在のところ実用になっていない。

エルミート型公式

高次の公式を作るのに、高階の導関数を直接計算してそれを使う。

最も簡単な例: 4 次公式

$$\boldsymbol{x}_1 = \boldsymbol{x}_0 + \frac{\Delta t}{2}(\boldsymbol{v}_1 + \boldsymbol{v}_0) - \frac{\Delta t^2}{12}(\boldsymbol{a}_1 - \boldsymbol{a}_0), \qquad (46)$$

$$\boldsymbol{v}_1 = \boldsymbol{v}_0 + \frac{\Delta t}{2}(\boldsymbol{a}_1 + \boldsymbol{a}_0) - \frac{\Delta t^2}{12}(\dot{\mathbf{a}}_1 - \dot{\mathbf{a}}_0). \qquad (47)$$

これは陰的公式。対称化には反復かなにかで方程式を解く必要がある。(収束は割合速い)

時間刻みの対称化

対称型公式でも、普通に時間刻みを変えると上手くいかない。

普通に (適当に) 時間刻みを変える

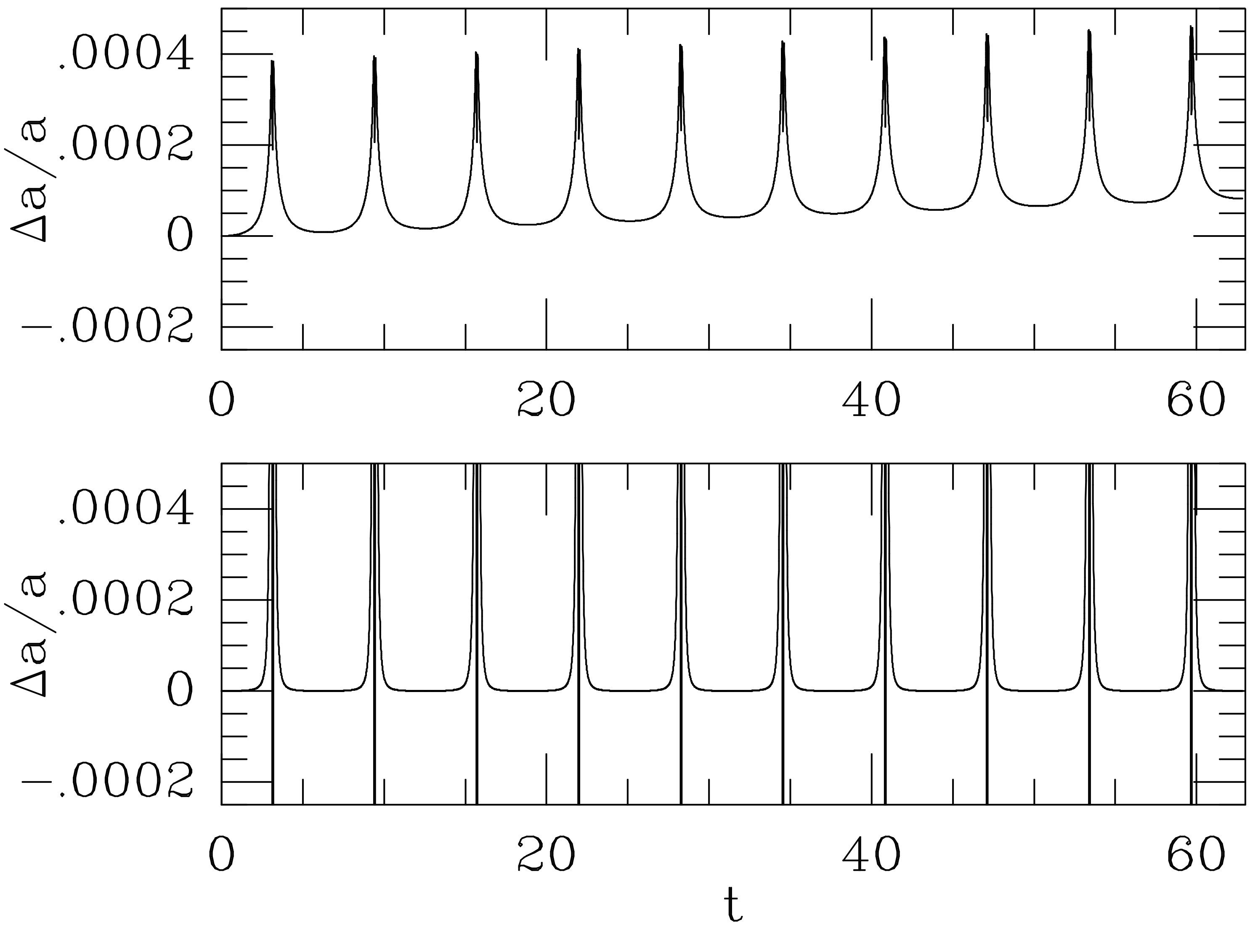
↓

行きと帰りでステップサイズが変わる

↓

元に戻らない

例—ケプラー問題、$e = 0.9$



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。

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。

一つの可能性は以下のようなもの。

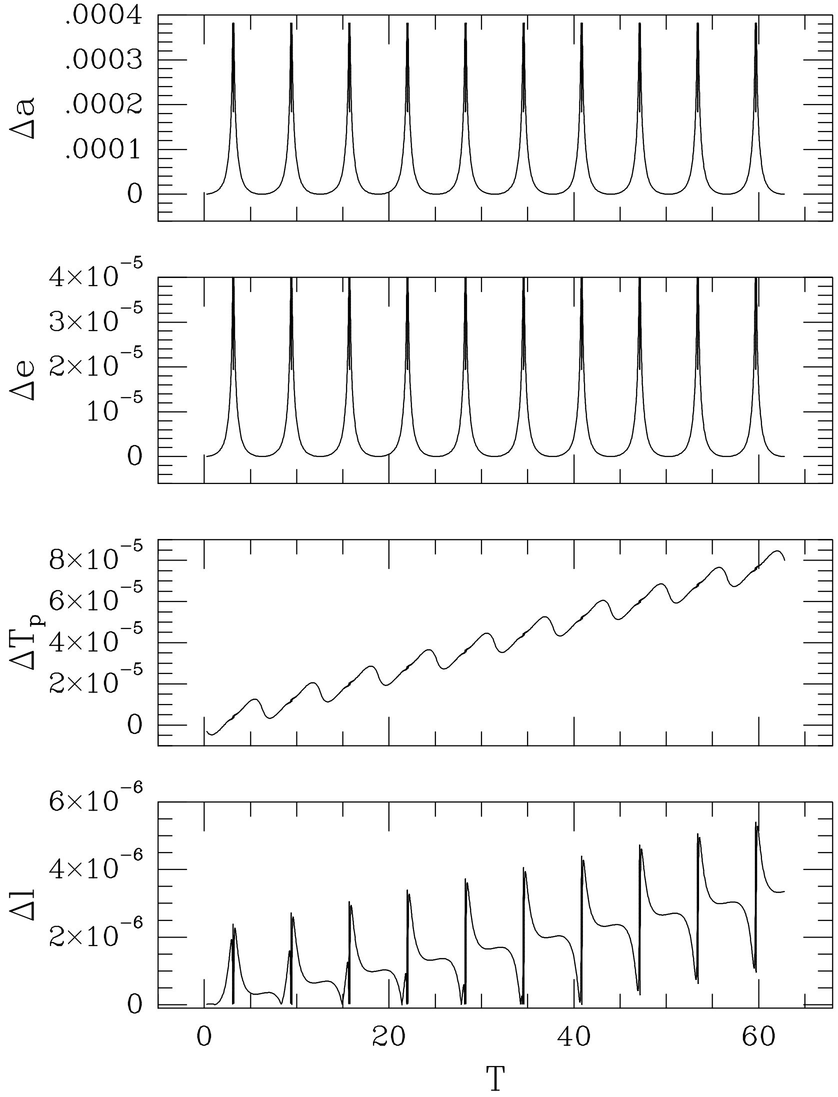
$$\Delta t = \frac{1}{2}[h(\xi_0) + h(\xi_1)] \tag{48}$$

ここで $h(\xi)$ は適当な時間刻みを与える関数

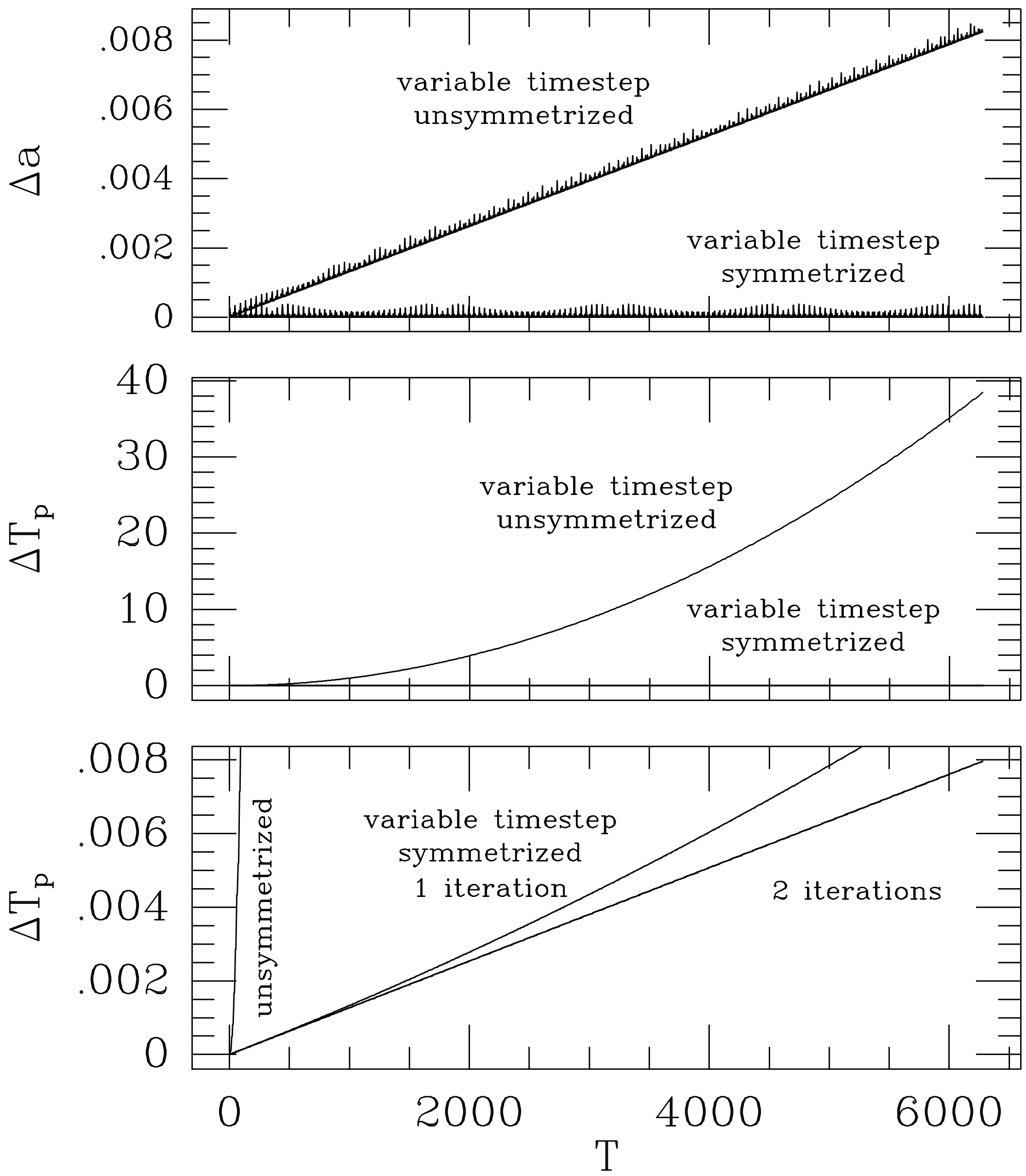
積分の始点と終点で時間刻みをそれぞれ計算して、その平均を取る

ξ_1 は Δtの関数であるので、これは時間刻み自体が陰的に決まるということ。

数値実験



.0004
.0003
.0002
.0001
0
Δa
4×10^−5
3×10^−5
2×10^−5
10^−5
0
Δe
8×10^−5
6×10^−5
4×10^−5
2×10^−5
0
ΔT_p
6×10^−6
4×10^−6
2×10^−6
0
Δl
0
20
40
60
T



.008
.006
.004
.002
0
Δa
variable timestep
unsymmetrized
variable timestep
symmetrized
40
30
20
10
0
ΔT_p
variable timestep
unsymmetrized
variable timestep
symmetrized
.008
.006
.004
.002
0
ΔT_p
unsymmetrized
variable timestep
symmetrized
1 iteration
2 iterations
0
2000
4000
6000
T

理論的にわかっていること

Cano と Sanz-Serna 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

のどれでも、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。

まとめ

というものは特にないですが、まあ、このあたりで。