

Chapter 14

数値積分法

14.1 シンプレクティック積分法

前の章の最後に、変分原理（修正ハミルトンの原理）からシンプレクティック積分法という積分法が導出されることを見た。この章ではこのスキームについて詳しく調べる。なお、この章では簡単のため、1自由度系について述べる。多自由度系への一般化は容易である。また、ハミルトニアンが運動エネルギー K とポテンシャル U の和

$$H(q, p) = K(p) + U(q) \quad (14.1)$$

で書かれており、 K と U がそれぞれ p と q だけに依存するような場合について主に考察する。

なお、この章ではいくつかのサンプルプログラムと共に、実際の数値計算例を（エネルギーの時間変化のグラフなどと共に）示すが、そこではそれぞれのスキームの特徴を示すために時間刻み幅 Δt をあえて大きくとっていることに注意すること。

正準座標

$$r = (q, p)$$

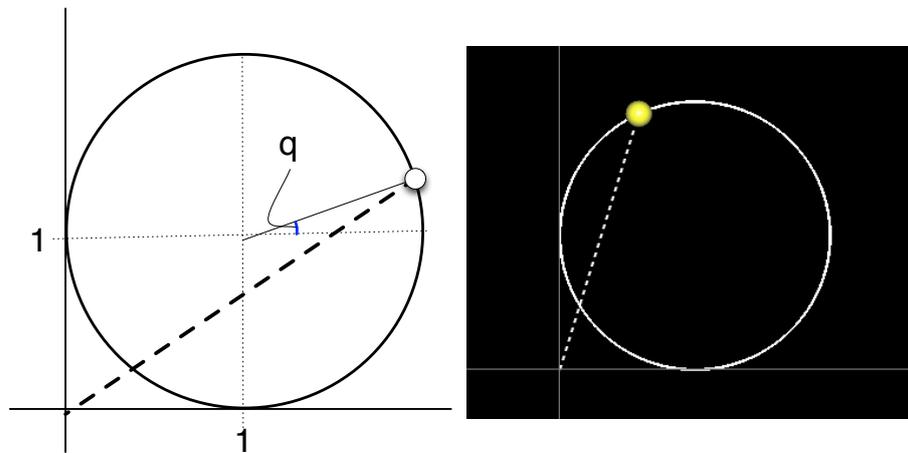
から、別の正準座標

$$R = (Q, P)$$

への変換が正準変換になっているとき、この変換はシンプレクティック条件を満たすことは以前示した。ある変換が正準変換になっていることを、「変換がシンプレクティックである」、あるいは「変換がシンプレクティック性をもつ」と表現する。シンプレクティック性をもつ数値積分法をシンプレクティック積分法という。

例題として、以前も考えたリング上を質点が滑るバネ=質点系をもう一度とりあげよう。 x 軸と y 軸に接する半径 1 の円周上を質量 m の質点が滑らかに滑る。原点と質点はバネ（ばね定数 k 、自然長 0）で結ばれている。図のように x 軸となす角度 q とする。ハミルトニアンを再掲すると

$$H(q, p) = \frac{p^2}{2m} + k(\cos q + \sin q) \quad (14.2)$$



このハミルトニアンは式 (14.1) の形になっていて

$$K(p) = \frac{p^2}{2m} \quad (14.3)$$

$$U(q) = k(\cos q + \sin q) \quad (14.4)$$

である。

14.2 1次陽的シンプレクティック法

前章で確認したように、1次（陽的）オイラー法はシンプレクティックになっていない。そのためにどのような悪影響があるのか、実際にリング上のバネ質点系 (14.2) を、1次オイラー法で解いてみよう。正準方程式を再掲すると、

$$\frac{dq}{dt} = \frac{p}{m} \quad (14.5)$$

$$\frac{dp}{dt} = k(\sin q - \cos q) \quad (14.6)$$

プログラムの中心部分は以下の通りである：

Listing 14.1: one_ball_on_ring_1stEuler.cpp

```

1
2 void euler1st(struct particle_ *particle, double dt)
3 {
4     //      Hamiltonian
5     //      H(q,p) = p^2/(2m) + k ( cos q + sin q )
6     //
7     double q = particle->pos[0];
8     double p = particle->pos[1];

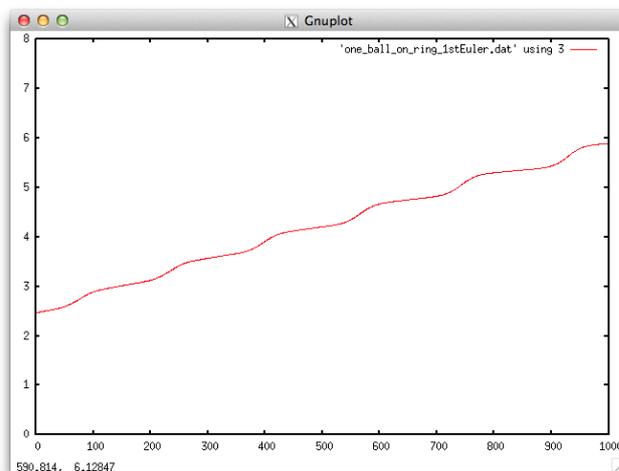
```

```

9     double dq, dp;
10    dq = ( p * MASS_INV ) * dt;
11    dp = ( SPRING_K * ( sin(q) - cos(q) ) ) * dt;
12    q += dq;
13    p += dp;
14
15    particle->pos[0] = q;
16    particle->pos[1] = p;
17
18    std::cout << "total energy: "
19              << std::scientific
20              << total_energy( particle->pos)
21              << std::endl;
22 }

```

たとえば、 $(q, p) = (2, 0)$ の初期条件の下で、これを実行すると…明らかに変なことが起きている。はじめは $q = -3\pi/4$ を中心に振動していた質点が、次第にその振幅を大きくしていき、ついには回転運動をはじめてしまう。これは系の全エネルギーが増加してしまっていることを意味する。実際に全エネルギーをプロットしてみるとそれが確認できる。



1次オイラー法は、1ステップで $O(\Delta t^2)$ の誤差がある。有限時間 T まで積分するには $N/\Delta t$ ステップだけ1次オイラー法を繰り返し適用するので、最終的には $O(\Delta t)$ の誤差が生じるのは仕方がない。しかしながらこの例のように全エネルギーが変わると解の振る舞いが（振動状態と回転状態の違いのように）定性的に異なる系に対しては、どれだけ長時間（多ステップ）積分しても全エネルギーはなるべく変わらないようにしたい。

1ステップで $O(\Delta t)$ の精度をもつ数値積分法（=1次精度積分法）は、 $(O(\Delta t^2)$ だけの自由度があるので）無限のバリエーションが存在する。1次オイラー法はその中の一つにすぎない。この章では無数にある1次精度積分法の中から「シン

プレクティック性をもつ」という条件を付けるとエネルギーの保存性がどうなるか調べよう。なお後で見るように1次精度のシンプレクティックな数値積分法も複数存在する。

ハミルトニアンが式(14.1)で与えられるとき、1次オイラー法は、

$$q^{n+1} = q^n + \Delta t \frac{dK}{dp}(p^n) \quad (14.7)$$

$$p^{n+1} = p^n - \Delta t \frac{dU}{dq}(q^n) \quad (14.8)$$

と書ける。これをほんの少し(赤字の部分)だけ変えて

1次シンプレクティック積分法: SI01a

$$q^{n+1} = q^n + \Delta t \frac{dK}{dp}(p^n) \quad (14.9)$$

$$p^{n+1} = p^n - \Delta t \frac{dU}{dq}(q^{n+1}) \quad (14.10)$$

とする。実はこの積分法はシンプレクティックな積分法になっている。

$r = (q^n, p^n)$ から $R = (q^{n+1}, p^{n+1})$ への変換が正準変換であることをポアソン括弧で調べてみよう。1自由度系の場合には $\{Q, Q\} = \{P, P\} = 0$ は自明なので、 $\{Q, P\}$ だけを調べれば良い。

$$Q = q + \Delta t \frac{dK(p)}{dp}$$

$$P = p - \Delta t \frac{dU(Q)}{dq} = p - \Delta t \frac{dU}{dq}(q + \Delta t \frac{dK(p)}{dp})$$

に注意すると、

$$\begin{aligned} \{Q, P\} &= \frac{\partial Q}{\partial q} \frac{\partial P}{\partial p} - \frac{\partial P}{\partial q} \frac{\partial Q}{\partial p} \\ &= 1 \times \left[1 - \left(\Delta t \frac{d^2 U}{dq^2} \right) \left(\Delta t \frac{d^2 K}{dp^2} \right) \right] - \left(-\Delta t \frac{d^2 U}{dq^2} \right) \left(\Delta t \frac{d^2 K}{dp^2} \right) \\ &= 1 - \Delta t^2 \frac{d^2 U}{dq^2} \frac{d^2 K}{dp^2} + \Delta t^2 \frac{d^2 U}{dq^2} \frac{d^2 K}{dp^2} \\ &= 1 \end{aligned} \quad (14.11)$$

従って式(14.9)と(14.10)は正準変換である。この積分法は1次精度の陽的なシンプレクティック法である。ここではこのスキームをSI01aと呼ぶことにする。

式(14.9)と(14.10)に基づいてコードを作ってみよう。見ての通り、このコードは1次オイラー法とほとんど同じである。

Listing 14.2: one_ball_on_ring_1stSymplectic.cpp

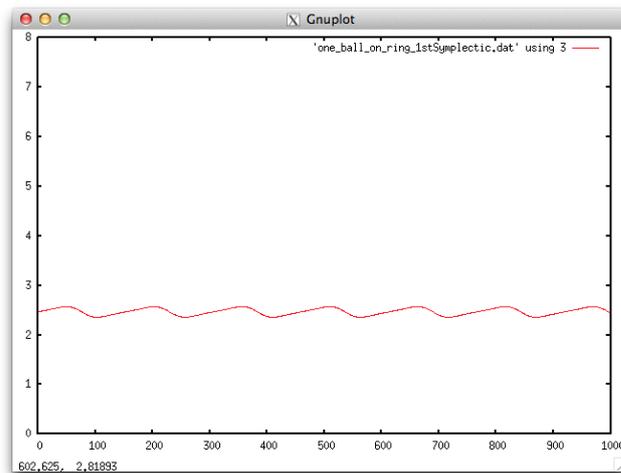
1

```

2 void symplectic1st(struct particle_ *particle, double dt)
3 {
4     //      Hamiltonian
5     //       $H(q,p) = p^2/(2m) + k (\cos q + \sin q)$ 
6     //
7     double p = particle->pos[1];
8     double q = particle->pos[0];
9     double dq, dp;
10
11     dq = ( p * MASS_INV ) * dt;
12     q += dq;
13
14     dp = ( SPRING_K * ( sin(q) - cos(q) ) ) * dt;
15     p += dp;
16
17     particle->pos[0] = q;
18     particle->pos[1] = p;
19
20     std::cout << "total energy: "
21               << std::scientific
22               << total_energy( particle->pos)
23               << std::endl;
24 }

```

このコードを実行すると、図のようにエネルギーは(振動こそすれ)オイラー法の時のように増大し続けることはなく、質点の運動が振動運動が回転運動に変わってしまうような明らかに定性的におかしな解になることもない。



1次シンプレクティック法SI01a[式(14.9)と(14.10)]と1次オイラー法[(14.7)と(14.8)]との違いはほんのわずかである。式(14.10)で前の時間ステップの値

q^n を使うと 1 次オイラー法となる。このわずかな違いによって積分がシンプレクティック (正準変換) になること、そしてその効果が大きいことは実に印象的である。

1 次シンプレクティック法 SI01a [式 (14.9) と (14.10)] では、式 (14.9) でまず q^n の値を q^{n+1} に更新してからその新しい q^{n+1} を使って式 (14.10) をつかって p^n を更新する。この順番を逆にした以下のスキーム (SI01b) もシンプレクティック性を持つことを確認することができる。

1 次シンプレクティック積分法: SI01b

$$p^{n+1} = p^n - \Delta t \frac{dU}{dq}(q^n) \quad (14.12)$$

$$q^{n+1} = q^n + \Delta t \frac{dK}{dp}(p^{n+1}) \quad (14.13)$$

14.3 シンプレクティック性の由来

積分法 SI01a がなぜ正準変換になっているのか、その由来を調べてみよう。

14.3.1 正準方程式の形式的厳密解

以下では相空間中の位置ベクトル (= つまり系の状態) r

$$r = \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix}$$

に作用する演算子を \hat{A} のようにハットを付けて書くことにする。

任意の関数 f と g のポアッソン括弧 $\{f, g\}$ を、 f に $\{\cdot, g\}$ という演算子が作用したものとみることにしよう。この演算子を $\hat{D}(g)$ と書くと

$$\hat{D}(g) = \{\cdot, g\} \quad (14.14)$$

あるいは任意の $f(q, p)$ に対して

$$\hat{D}(g) f = \{f, g\} \quad (14.15)$$

である。

演算子 \hat{D} を使うと、ハミルトニアンが $H(q, p)$ で与えられる一般的な力学の系における正準方程式は

$$\frac{dr}{dt} = \hat{D}(H) r \quad (14.16)$$

これは正準方程式を書き換えただけであるが、「 $\hat{D}(H)$ は状態の時間微分演算子である」という意味が明確になる。

時刻 t の状態 $r = r(t)$ から τ だけ時間が経った状態を $r(t + \tau)$ とする。ここでは τ は有限であり、大小は特に限定しない。テーラー展開から

$$r(t + \tau) = r + \frac{\tau}{1!} \frac{d}{dt} r + \frac{\tau^2}{2!} \frac{d^2}{dt^2} r + \frac{\tau^3}{3!} \frac{d^3}{dt^3} r + \dots \quad (14.17)$$

$$= r + \frac{\tau}{1!} \hat{D}(H)r + \frac{\tau^2}{2!} \hat{D}(H)^2 r + \frac{\tau^3}{3!} \hat{D}(H)^3 r + \dots \quad [\text{式 (14.16) より}]$$

$$= \text{Exp}(\tau \hat{D}(H)) r \quad (14.18)$$

ここで指数関数との類似から、演算子 \hat{A} の「指数関数」を

$$\hat{\text{Exp}}(\hat{A}) := \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \hat{A}^n \quad (14.19)$$

と定義した。演算子 $\text{Exp}(\tau \hat{D}(H))$

$$\text{Exp}(\tau \hat{D}(H)) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\tau^n}{n!} \hat{D}(H)^n \quad (14.20)$$

は一般的な力学系に対する時間推進の演算子である。

前章で示したように、ハミルトニアン $H(r)$ によって定まる $r(t) \Rightarrow r(t + \tau)$ という (運動による) 写像はシンプレクティック変換なので、時間推進の演算子 $\text{Exp}(\tau \hat{D}(H))$ はシンプレクティック変換である。

また、ある座標変換 $r(0) \Rightarrow r' = r(\tau)$ について、

$$r' = \text{Exp}(\tau \hat{D}(h)) r \quad (14.21)$$

という形で書けるような関数 $h(q, p)$ が存在すれば、この変換は正準変換であり、その変換は h をハミルトニアンとする系の (初期条件 r から出発して r' に至る) 運動に一致する。

まとめると、ハミルトニアンは (正準方程式を通じて) 運動を記述する。そしてその運動はある時刻の状態 $r(t)$ から別の状態 $r(t + \tau)$ への変換 (あるいは写像) であり、その写像は正準変換である。その正準変換は時間推進の演算子で記述される。模式的に書けば以下ようになる。

$$\text{ハミルトニアン } H \Leftrightarrow \text{運動} \Leftrightarrow \text{正準変換} \Leftrightarrow \text{演算子 } \text{Exp}(\hat{D}(\tau H)) \quad (14.22)$$

14.3.2 時間推進演算子が解ける例

正準方程式 (14.16) の厳密解は時間推進演算子 (14.20) を使って形式的には解くことができるが、一般的なハミルトニアンに対してこの時間推進演算子を具体的に計算することは困難である。

例外的に形式解が計算できる (= 正準方程式が積分できる) 場合の一つは、ハミルトニアンが

$$H = K(p) \quad (14.23)$$

という形で与えられる場合である。これはポテンシャルの存在しない系の運動（自由運動）に相当する。この時、正準方程式は

$$\frac{d\mathbf{r}}{dt} = \begin{pmatrix} \frac{dq}{dt} \\ \frac{dp}{dt} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{dK}{dp}(p) \\ 0 \end{pmatrix} \quad (14.24)$$

であり、この微分方程式の解は以下のように容易に解ける。初期条件を

$$\mathbf{r}_0 = \begin{pmatrix} q_0 \\ p_0 \end{pmatrix} \quad (14.25)$$

とすれば

$$\mathbf{r}(\tau) = \begin{pmatrix} q_0 + \tau \frac{dK}{dp}(p_0) \\ p_0 \end{pmatrix} \quad (14.26)$$

が解である。従ってこのハミルトニアン $K(p)$ に対する任意の時間 τ に対して時間推進演算子

$$\mathbf{r}(t + \tau) = \text{Exp}(\tau \hat{D}(K)) \mathbf{r}(t) \quad (14.27)$$

は具体的に書けて

$$\text{Exp}(\tau \hat{D}(K)) \mathbf{r} = \begin{pmatrix} q + \tau \frac{dK}{dp}(p) \\ p \end{pmatrix} \quad (14.28)$$

である。

同様にハミルトニアンが q のみの関数

$$H = U(q) \quad (14.29)$$

の場合についても時間推進演算子は厳密に計算できる。このとき正準方程式

$$\frac{d\mathbf{r}}{dt} = \begin{pmatrix} \frac{dq}{dt} \\ \frac{dp}{dt} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ -\frac{dU}{dq}(q) \end{pmatrix} \quad (14.30)$$

の解は

$$\mathbf{r}(\tau) = \begin{pmatrix} q_0 \\ p_0 - \tau \frac{dU}{dq}(q_0) \end{pmatrix} \quad (14.31)$$

従って時間推進演算子は

$$\text{Exp}(\tau \hat{D}(U)) \mathbf{r} = \begin{pmatrix} q \\ p - \tau \frac{dU}{dq}(q) \end{pmatrix} \quad (14.32)$$

である。

14.3.3 シンプレクティック積分法の演算子による表現

シンプレクティック積分法 SI01a を演算子で表現してみる。簡単のために

$$\mathbf{r} = \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} q^n \\ p^n \end{pmatrix}, \quad \mathbf{r}' = \begin{pmatrix} q' \\ p' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} q^{n+1} \\ p^{n+1} \end{pmatrix}, \quad \tau = \Delta t$$

とすると、式 (14.9) と (14.10) は

$$q' = q + \tau \frac{dK}{dp}(p) \quad (14.33)$$

$$p' = p - \tau \frac{dU}{dq}\left(q + \tau \frac{dK}{dp}(p)\right) \quad (14.34)$$

$$(14.35)$$

である。

演算子 $K(p)$ に対しては

$$\hat{D}(K) = \frac{dK}{dp} \frac{\partial}{\partial q} \quad (14.36)$$

$U(q)$ に対しては

$$\hat{D}(U) = -\frac{dU}{dq} \frac{\partial}{\partial p} \quad (14.37)$$

であることに注意すると、式 (14.33) は

$$q' = q + \tau \hat{D}(K) q = (1 + \tau \hat{D}(K)) q \quad (14.38)$$

と書ける。一方テーラー展開により式 (14.34) は以下のように書き換えられる。

$$\begin{aligned} p' &= p - \tau \left(\frac{dU}{dq} + \tau \frac{dK}{dp} \frac{d^2U}{dq^2} + \frac{\tau^2}{2!} \left(\frac{dK}{dp} \right)^2 \frac{d^3U}{dq^3} + \frac{\tau^3}{3!} \left(\frac{dK}{dp} \right)^3 \frac{d^4U}{dq^4} + \dots \right) \\ &= p - \tau \left\{ \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\tau^n}{n!} \left(\frac{dK}{dp} \frac{d}{dq} \right)^n \right\} \frac{dU}{dq} \\ &= \left\{ \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\tau^n}{n!} \hat{D}(K)^n \right\} \left(p - \tau \frac{dU}{dq} \right) \\ &= \text{Exp}(\hat{D}(K)) (1 + \tau \hat{D}(U)) p \end{aligned} \quad (14.39)$$

ここで

$$\hat{D}(U)^n p = 0 \quad (n \geq 2) \quad (14.40)$$

に注意すると式 (14.39) は

$$p' = \hat{\text{Exp}}(\tau \hat{D}(K)) \hat{\text{Exp}}(\tau \hat{D}(U)) p \quad (14.41)$$

と書ける。同様に

$$\hat{D}(U)^n q = 0 \quad (n \geq 1), \quad \hat{D}(K)^n q = 0 \quad (n \geq 2) \quad (14.42)$$

を使うと、式 (14.38) は

$$q' = \hat{\text{Exp}}(\tau \hat{D}(K)) \hat{\text{Exp}}(\tau \hat{D}(U)) q \quad (14.43)$$

と書けることが分かる。つまり

$$r' = \hat{S}_a(\tau) r \quad (14.44)$$

である。この

$$\hat{S}_a(\tau) := \hat{\text{Exp}}(\tau \hat{D}(K)) \hat{\text{Exp}}(\tau \hat{D}(U)) \quad (14.45)$$

は、積分法 SI01a による状態 r の (時間 τ 分の) 数値的な積分を表す演算子である。

変換 $\text{Exp}(\tau \hat{D}(K))$ と変換 $\text{Exp}(\tau \hat{D}(U))$ はどちらも正準変換であり、前の章で示したように正準変換の合成変換は正準変換なので、1 次シンプレクティック積分法 \hat{S}_a [式 (14.45)] は正準変換である。こうして積分公式 SI01a がシンプレクティック性を持つことは確認するまでもなく自明となった。

式 (14.45) の右辺の演算子の順番に注意しよう。SI01a のアルゴリズムでは、まず $K(p)$ から計算される時間推進演算子 $\text{Exp}(\hat{D}(K))$ で状態 r を別の状態 r^* に変換してから、変換後の正準座標系 r^* の下で計算される時間推進演算子 $\text{Exp}(\hat{D}(U))$ で状態 r^* を変換する。

非可換な座標変換では操作の順番に注意しなければならない。たとえばカーテン座標系 (x, y, z) で z 軸の周りの 90 度の回転を演算子 \hat{R} 、 x 軸方向への 1 だけの平行移動を演算子 \hat{T} とすると

$$\hat{R} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -y \\ x \\ z \end{pmatrix} \quad (14.46)$$

$$\hat{T} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x+1 \\ y \\ z \end{pmatrix} \quad (14.47)$$

である。

背景となる座標系を固定して、点

$$a = \begin{pmatrix} a \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

を、(1) x 軸方向に 1 だけ平行移動 (\hat{T}) してから、(2) z 軸周りに回転させる (\hat{R}) という操作 (左辺) とその結果 (右辺) は以下の通りである。

$$\hat{R} \hat{T} a = \begin{pmatrix} 0 \\ a+1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (14.48)$$

二つの座標変換の合成変換は、作用させる順番に右から左に演算子を並べていることに注意しよう。

上の操作は、座標変換の演算子 \hat{R} や \hat{T} を定義される座標系そのものを毎回変換させるものとして考えると、まず (1) 座標を z 軸周りに回転 (\hat{R}) させてから、(1) (変換後の座標を x 軸方向に 1 だけ平行移動させる (\hat{T}) と考えても同じで操作と結果は式 (14.48) になる。だが、こう考える場合は先に作用させる演算子を左から順番に置くことになる。

シンプレクティック積分法 SI01 [式 (14.7) と (14.8)] は

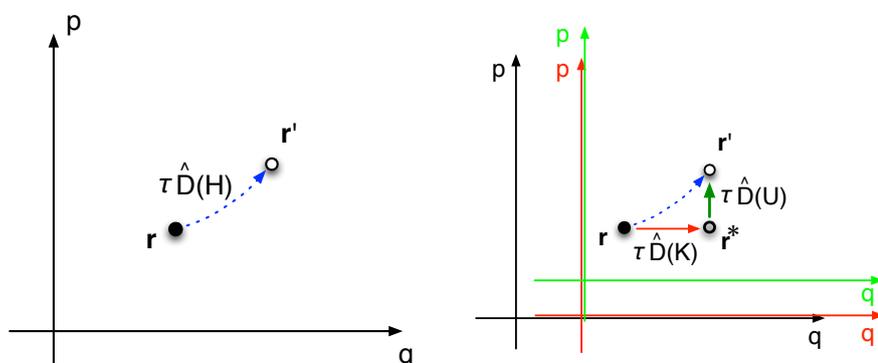
$$q^* = q^n + \Delta t \frac{dK}{dp}(p^n) \quad (14.49)$$

$$p^* = p^n - \Delta t \frac{dK}{dq}(q^n) \quad (14.50)$$

$$q^{n+1} = q^* + \Delta t \frac{dU}{dp}(p^*) \quad (14.51)$$

$$p^{n+1} = p^* - \Delta t \frac{dU}{dq}(q^*) \quad (14.52)$$

と二つの変換に分けられることに注意しよう。これは、ハミルトニアン K の厳密な時間推進演算子 (14.28) を適用して座標を r^* に適用してから、新しい正準座標 r^* の下で計算したハミルトニアン U の厳密な時間推進演算子 (14.32) を適用していることを意味する。従って式 (14.45) ではハミルトニアン K による変換が左にある。



14.3.4 合成変換による厳密解の近似

ハミルトニアンが $K(p)$ の時には時間推進演算子 $\text{Exp}(\tau \hat{D}(K))$ が式 (14.28) として、また、ハミルトニアンが $U(q)$ の時には時間推進演算子 $\text{Exp}(\tau \hat{D}(U))$ が式 (14.32) として具体的な形が得られた。しかし、ハミルトニアンが

$$H(q, p) = K(p) + U(q) \quad (14.53)$$

という形の時の時間推進演算子

$$\text{Exp}(\tau\hat{D}(H)) = \text{Exp}(\tau\hat{D}(K) + \tau\hat{K}(U)) \quad (14.54)$$

は具体的に計算することができない。演算子の指数関数の定義式 (14.19) に従って右辺を計算すると

$$\begin{aligned} \text{Exp}(\tau\hat{D}(K) + \tau\hat{K}(U)) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\tau\hat{D}(K) + \tau\hat{K}(U) \right)^n \\ &= 1 + \tau\hat{D}(K) + \tau\hat{K}(U) \\ &\quad + \frac{\tau^2}{2!} \left(\hat{D}(K)^2 + \hat{D}(K)\hat{D}(U) + \hat{D}(U)\hat{D}(K) + \hat{D}(U)^2 \right) \\ &\quad + \frac{\tau^3}{3!} \left(\hat{D}(K)^3 + \hat{D}(K)^2\hat{D}(U) + \hat{D}(K)\hat{D}(U)\hat{D}(K) + \dots \right) \\ &\quad + \dots \end{aligned} \quad (14.55)$$

となり、一般にはゼロにならない

$$\hat{D}(K)^n \hat{D}(U)^m$$

の項が無数にあるためである。

シンプレクティック積分法 SI01a は厳密な時間推進演算子 $\text{Exp}(\tau\hat{D}(K) + \tau\hat{K}(U))$ を、(演算の形が既知である) 二つの演算子 $\text{Exp}(\tau\hat{D}(K))$ と $\text{Exp}(\tau\hat{D}(U))$ を組み合わせて

$$\text{Exp}(\tau\hat{D}(H)) = \text{Exp}(\tau\hat{D}(K) + \tau\hat{K}(U)) \sim \text{Exp}(\tau\hat{D}(K)) \text{Exp}(\tau\hat{D}(U)) \quad (14.56)$$

と近似した方法なのである。

近似式 (14.56) の誤差を見積もってみよう。

$$\begin{aligned} \text{Exp}(\tau\hat{D}(K)) \text{Exp}(\tau\hat{D}(U)) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\tau^n}{n!} \hat{D}(K)^n \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\tau^m}{m!} \hat{D}(U)^m \\ &= 1 + \tau\hat{D}(K) + \tau\hat{D}(U) \\ &\quad + \frac{\tau^2}{2!} \left(\hat{D}(K)^2 + 2\hat{D}(K)\hat{D}(U) + \hat{D}(U)^2 \right) \\ &\quad + \dots \end{aligned} \quad (14.57)$$

なので、

$$\text{Exp}(\tau\hat{D}(K) + \tau\hat{K}(U)) = \text{Exp}(\tau\hat{D}(K)) \text{Exp}(\tau\hat{D}(U)) + \hat{Err}(\tau) \quad (14.58)$$

とすると、式 (14.55) より

$$\hat{Err}(\tau) = \frac{\tau^2}{2} \left(\hat{D}(K)\hat{D}(H) - \hat{D}(U)\hat{D}(K) \right) + \dots \quad (14.59)$$

つまり 1 ステップの誤差は $O(\tau^2)$ である。これは 1 次オイラー法と同じである。1 ステップあたりの精度は同じなのに SI01a にするとなぜ長時間積分しても全エネルギーがずれていかないのかその理由を次に探る。

14.4 エネルギーの誤差

積分公式 SI01a (及び SI01b) によって、時刻 $t = t^n$ の状態

$$\mathbf{r}^n = \begin{pmatrix} q^n \\ p^n \end{pmatrix} \quad (14.60)$$

が時刻 $t = t^n + \Delta t$ の状態

$$\mathbf{r}^{n+1} = \begin{pmatrix} q^{n+1} \\ p^{n+1} \end{pmatrix} \quad (14.61)$$

に移る。この変換 $\mathbf{r}^n \Rightarrow \mathbf{r}^{n+1}$ は一つの正準変換なので、この正準変換に対応する「仮想的な運動」が存在するはずである。そしてその仮想的な運動に対応するハミルトニアン \tilde{H} も存在するはずである。(模式的な式 (14.22) を見よ。) そのハミルトニアン \tilde{H} は、今考えている(数値積分で解こうとしている)本来のハミルトニアン H

$$H(q, p) = K(p) + U(q) \quad (14.62)$$

とは一致しない。(一致するのであれば、SI01a は上のハミルトニアンの厳密解を計算できる理想的な数値積分法ということになる。) 本来のハミルトニアン H ではないが、SI01a は \tilde{H} というハミルトニアンに対する厳密な数値積分法になっている。これの意味するところは大きい。厳密解であれば、この系のエネルギー \tilde{H} が保存する。つまり計算スキーム SI01a はどれだけ長時間積分してもエネルギー \tilde{H} を一定に保つ。では \tilde{H} と H はどれだけずれているのであろうか?

式 (14.58) を再掲すると

$$\text{Exp}(\tau \hat{D}(K) + \tau \hat{K}(U)) = \underline{\text{Exp}(\tau \hat{D}(K)) \text{Exp}(\tau \hat{D}(U))} + \hat{Err}(\tau) \quad (14.63)$$

この下線部が「仮想的な運動」に対応する演算子 $\text{Exp}(\tau \hat{D}(\tilde{H}))$ に一致するはずなので、

$$\text{Exp}(\tau \hat{D}(\tilde{H})) = \text{Exp}(\tau \hat{D}(K)) \text{Exp}(\tau \hat{D}(U)) \quad (14.64)$$

と置き、この \tilde{H} を求める。

一般に非可換演算子 \hat{A} , \hat{B} に対して以下の公式 (Baker-Campbell-Hausdorff 公式) が成り立つ。

$$\text{Exp}(\hat{A}) \text{Exp}(\hat{B}) = \text{Exp}(\hat{C}) \quad (14.65)$$

$$\begin{aligned} \hat{C} = & \hat{A} + \hat{B} + \frac{1}{2}[\hat{A}, \hat{B}] \\ & + \frac{1}{12}[\hat{A} - \hat{B}, [\hat{A}, \hat{B}]] \\ & - \frac{1}{24}[\hat{B}, [\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]]] + \dots \end{aligned} \quad (14.66)$$

ここで

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} \quad (14.67)$$

等である。これを使うと、

$$\text{Exp}(\tau\hat{D}(K))\text{Exp}(\tau\hat{D}(U)) = \text{Exp}(\hat{C}) \quad (14.68)$$

として

$$\begin{aligned} \hat{C} &= \tau\hat{D}(K) + \tau\hat{D}(U) + \frac{\tau^2}{2}[\hat{D}(K), \hat{D}(U)] \\ &\quad + \frac{\tau^3}{12}[\hat{D}(K) - \hat{D}(U), [\hat{D}(K), \hat{D}(U)]] \\ &\quad - \frac{\tau^4}{24}[\hat{D}(U), [\hat{D}(K), [\hat{D}(K), \hat{D}(U)]]] + \dots \\ &= \tau\hat{D}(K) + \tau\hat{D}(U) + \frac{\tau^2}{2}\hat{D}(\alpha) \\ &\quad + \frac{\tau^3}{12}[\hat{D}(K - U), \hat{D}(\alpha)] \\ &\quad - \frac{\tau^4}{24}[\hat{D}(U), [\hat{D}(K), \hat{D}(\alpha)]] + \dots \\ &= \tau\hat{D}(K) + \tau\hat{D}(U) + \frac{\tau^2}{2}\hat{D}(\alpha) \\ &\quad + \frac{\tau^3}{12}\hat{D}(\{\alpha, K - U\}) \\ &\quad - \frac{\tau^4}{24}\hat{D}(\{\{\alpha, K\}, U\}) + \dots \\ &= \tau\hat{D}(K + U + \frac{\tau}{2}\alpha + \frac{\tau^2}{12}\{\alpha, K - U\} - \frac{\tau^3}{24}\{\{\alpha, K\}, U\} + \dots) \end{aligned} \quad (14.69)$$

ここで

$$\alpha := \{U, K\} \quad (14.70)$$

である。上の式変形では

$$\hat{D}(K) - \hat{D}(U) = \hat{D}(K - U) \quad (14.71)$$

などの \hat{D} の線形性と、次の公式 (14.72) を複数回使った：任意の f, g に対して

$$[\hat{D}(f), \hat{D}(g)] = \hat{D}(\{g, f\}) \quad (14.72)$$

これはヤコビ恒等式を使えば証明できる。

式 (14.64) と (14.68), (14.69) より

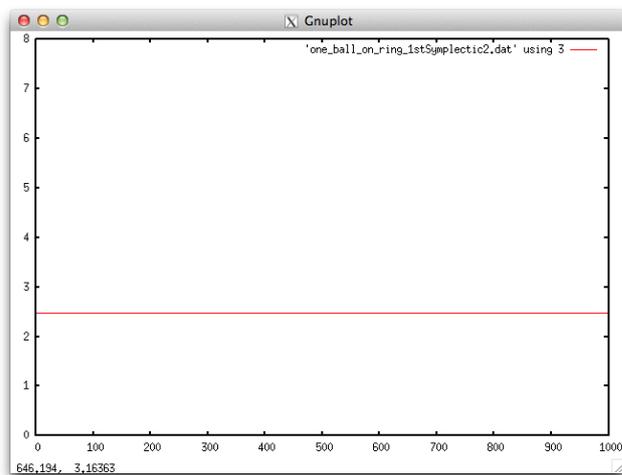
$$\tilde{H} = K + U + \frac{\tau}{2}\alpha + \frac{\tau^2}{12}\{\alpha, K - U\} - \frac{\tau^3}{24}\{\{\alpha, K\}, U\} + \dots \quad (14.73)$$

である。ハミルトニアン (14.62) との差は

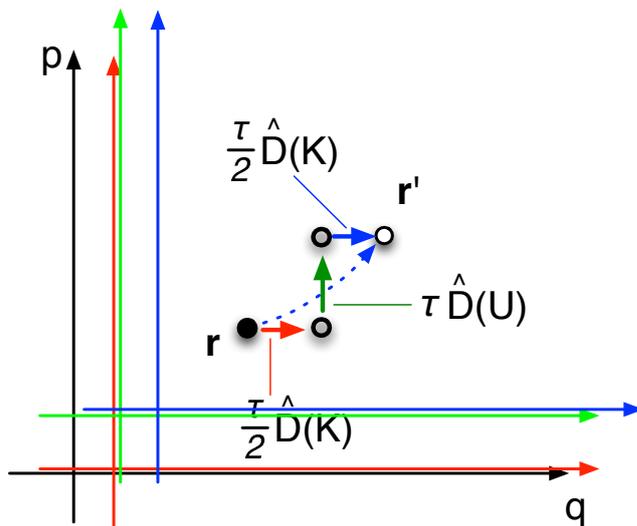
$$\tilde{H} - H = \frac{\tau}{2}\alpha + \frac{\tau^2}{12}\{\alpha, K - U\} - \frac{\tau^3}{24}\{\{\alpha, U\}, K\} + \dots \quad (14.74)$$

シンプレクティック積分法 SI01a はどれだけ積分しても、常に \tilde{H} を一定に保つが、その値は本来の系のエネルギー H とは $O(\tau)$ だけしかずれていないことをこの式は意味する。

この章の最初の例題にもどると、SI01a では $O(\tau)$ でエネルギーが振動していた。計算修正されたエネルギー \tilde{H} は厳密に保存するはずである。式 (14.73) の無限級数を計算することはできないので、 $O(\tau^2)$ の項までで \tilde{H} を近似してプロットしたグラフが以下である。



14.5 高精度化



1次精度のシンプレクティック法 SI01a (または SI01b) の精度を上げるためには次のようにすれば良い。一般に演算子 \hat{A} と \hat{B} に対して

$$\text{Exp}(\tau\hat{A} + \tau\hat{B}) = \text{Exp}\left(\frac{\tau}{2}\hat{A}\right) \text{Exp}(\tau\hat{B}) \text{Exp}\left(\frac{\tau}{2}\hat{A}\right) + O(\tau^3) \quad (14.75)$$

である。そこで、ハミルトニアン

$$H = U(q) + K(p) \quad (14.76)$$

に対する時間推進演算子を

$$\text{Exp}(\tau\hat{D}(H)) \sim \text{Exp}\left(\frac{\tau}{2}\hat{D}(K)\right) \text{Exp}(\tau\hat{D}(U)) \text{Exp}\left(\frac{\tau}{2}\hat{D}(K)\right) \quad (14.77)$$

と近似すれば、その誤差は $O(\tau^3)$ なので2次精度の数値積分法になっている。また、右辺は既知(式(14.28)と式(14.32))の正準変換の合成したものであるため、全体としても明らかに正準変換になっている。つまりこれは2次シンプレクティック法である。さらにより高次のシンプレクティック積分法も開発されている。

最後に: この章では、式(14.76)という特殊な形のハミルトニアンに対する陽的なシンプレクティック積分法を紹介した。一般的なハミルトニアンに対するシンプレクティック法も存在するが、それは陰的な方法である。つまり毎ステップ連立方程式を解く必要がある。

14.6 シンプレクティック法以外の数値積分法

シンプレクティック法の利点は、長時間積分してもエネルギーが真の値から大きくずれないということである。このような性質を持つ数値積分法はシンプレクティック法以外にもあり、現在活発に研究されている。その一つとして、構造保存型数値積分法(石川・谷口)を紹介しよう。

例題として式(14.2)のハミルトニアンで与えられるバネ質点系を考える。この数値積分法では、この問題に対してたとえば以下のようにして積分を行う¹。

$$q^{n+2} = q^n + \frac{\Delta t}{m} (p^{n+1} + p^n) \quad (14.78)$$

$$p^{n+2} = p^n - 2k\Delta t \left[\frac{\cos(q^{n+2}) - \cos(q^{n+1})}{q^{n+2} - q^{n+1}} + \frac{\sin(q^{n+2}) - \sin(q^{n+1})}{q^{n+2} - q^{n+1}} \right] \quad (14.79)$$

n ステップ目のエネルギー

$$H(q^n, p^n) = \frac{(p^n)^2}{2m} + k(\cos q^n + \sin q^n) \quad (14.80)$$

に修正項を加えた離散エネルギーと呼ばれる量

$$H_d^n(q^n, p^n) := H^n(q^n, p^n) - \frac{1}{2\Delta t} (q^{n+1} - q^n) (p^n - p^{n-1}) \quad (14.81)$$

¹横川研の学生(M1)の石川さんに教えてもらった。

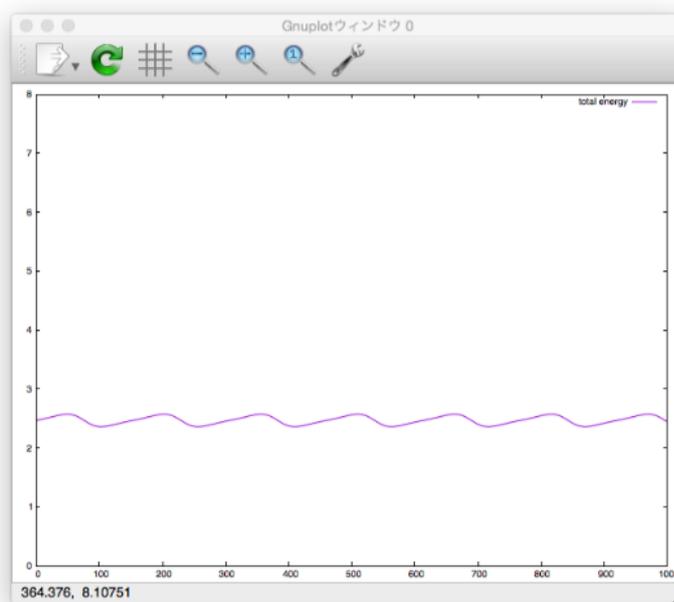


図 14.1: 全エネルギー

は、 $H_d^{n+2} = H_d^{n+1}$ という関係を満たすことが、式 (14.78) と (14.79) を直接代入することで確認できる。つまりこの離散エネルギーはこの積分法で保存する。真のエネルギーとの差は

$$H^n - H_d^n = \frac{1}{2\Delta t} (q^{n+1} - q^n) (p^n - p^{n-1}) \sim \frac{1}{2} \dot{q}^n \dot{p}^n \Delta t \quad (14.82)$$

なので、その差は $O(\Delta t)$ である。図 14.1 に H^n の時間発展を示した。なお、この章の冒頭に記したように、ここではあえて Δt を大きくとっていることに注意。

式 (14.78) と (14.79) のスキームでは、 n ステップ目の q や p の値 (q^n, p^n) を求めるのに、 Δt だけ過去の値 (q^{n-1}, p^{n-1}) と、 $2\Delta t$ だけ過去の値 (q^{n-2}, p^{n-2}) が必要である。(このような数値積分法を多段法と呼ぶ。) サンプルコードでは、初期条件 (q^0, p^0) から $\Delta t/10$ の時間刻みでシンプレクティック法 (SI01a) を 10 回適用して (q^1, p^1) を求めている。(Listing 14.3 の if 文の中。)

Listing 14.3: one_ball_on_ring_ishikawa.cpp

```

1 void integrator(struct particle_ *particle, double dt)
2 {
3     //      Hamiltonian
4     //      H(q,p) = p^2/(2m) + k ( cos q + sin q )
5     //      dq/dt = ( p * MASS_INV )
6     //      dp/dt = ( SPRING_K * ( sin(q) - cos(q) ) )
7     //

```

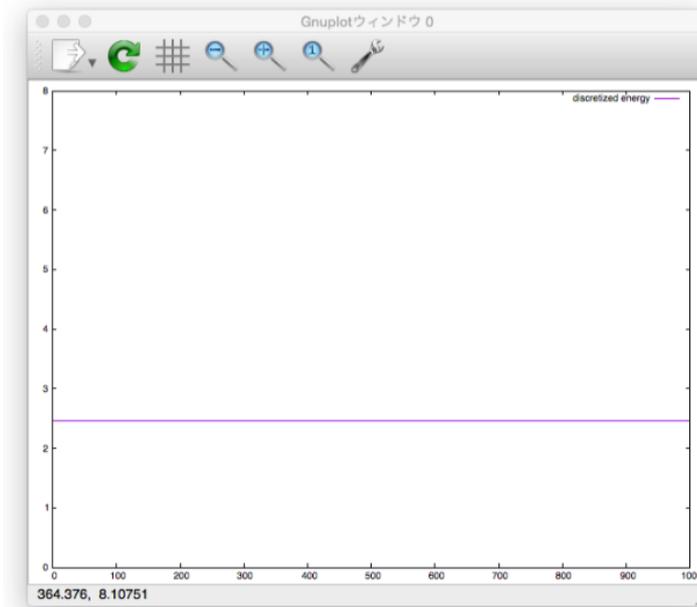



図 14.2: 離散エネルギー

```
54         std::cout << std::scientific
55             << "Total energy: "
56             << total_energy (particle->pos-1)
57             << "... Discretized energy: "
58             << modified_energy (dt, particle->pos-0, particle->pos-1, particle->pos-2)
59             << std::endl;
60     }
```

離散エネルギーのグラフを図 14.2 に示す。