

Symplectic 数値解法による散逸系及び 不規則軌道の安定性の評価

石井 一夫・下山 大徳・白濱 直哉

岡山理科大学理学部応用物理学科

(1995年9月30日 受理)

1. 序 論

微分方程式の数値計算で、一般的な方法として Runge-Kutta 法を中心に様々な方法があるが、それらは力学系において保存量であるエネルギーや角運動量に打ち切り誤差からくる永年誤差を生じさせる。このような誤差を生じさせない方法の一つに Symplectic 型数値積分法がある。我々は、最初に従来の数値積分法との比較のもとに Symplectic 数値積分法をコンピュータで評価を行ない、次に Hénon-Heiles 系への適用と評価、最後に散逸系への評価をおこなう。Symplectic 理論を簡単にまとめると以下のようになる¹⁾。

まず 2-形式

$$\tilde{\omega} = dp^i \wedge dq_i$$

で定義される Symplectic 形式を導入する。これによって定まる空間を Symplectic 多様体という。2-形式 $\tilde{\omega}$ と空間内の任意のベクトルとハミルトン場を作る。Liouville 演算子 \hat{X}_H との内積はハミルトニアンを生成する。ここで \hat{X}_H は

$$\hat{X}_H = \frac{\partial H}{\partial p} \frac{\partial}{\partial q} - \frac{\partial H}{\partial q} \frac{\partial}{\partial p}$$

を示す。これを Symplectic 変換といい \hat{X}_H によって生成される正準方程式の位相空間も Symplectic 多様体であることを意味している。このような数学的な結果はハミルトン系の数値解析に興味深い現象を表す。 q_i, p_i をまとめて

$$(q^1, \dots, q^N, p_1, \dots, p_N) = (z^1, \dots, z^N, z^{N+1}, \dots, z^{2N})$$

と表すと正準方程式は

$$\frac{dz^m}{dt} = \hat{X}_H z^m \quad (m = 1, \dots, 2N)$$

と書き下せる。これを積分すれば

$$z^m(t_n) = T \exp \left[\int_{t_0}^{t_n} dt \hat{X}_H(t) \right] z^m(t_0)$$

となる。ここで T は時間順序積である。これは正準方程式の形式解であるが $z^m(t_n)$ は $z^m(t_0)$ の時間発展の生成演算子 $\exp\{dt \hat{X}_H(t)\}$ による変換の結果で Symplecticity を保っていることがわかる。これがこの解法における基本的な考え方であるが具体的には Lie 代数により議論される。では実際の数値解法でどのように近似を行なっているかであるが \hat{X}_H が単独でしかも求積可能な場合は簡単に評価できるが、 $\hat{X}_H = \hat{A} + \hat{B}$ の場合は厳密には評価できない。つまり BCH の公式より \hat{A} , \hat{B} が非可換ならば

$$\exp\{\tau(\hat{A} + \hat{B})\} = \exp\{\tau\hat{C}\}$$

$$\hat{C} = \hat{A} + \hat{B} + \frac{\tau}{2}\{A, B\} + \frac{\tau^2}{12}(\{A, \{A, B\}\} + \{B, \{B, A\}\}) + \dots$$

となるからである。($\{A, B\}$ は Poisson の括弧式)

そこで

$$\exp\{\tau(A+B)\} = \exp(\tau A)\exp(\tau B) + O(\tau^2)$$

のように近似する。高次の解法では右辺の指数を増やすことによってより近似をよくする。今回は主に陽的な解法を使って計算する。第 2 章では Runge-Kutta 法との比較をコンピュータでシミュレーションしてみる。

2. 数値解法の安定性

まず始めに Runge-Kutta 法の誤差が長時間の積分にどれだけ影響を与えるかシミュレーションする。テストケースとして非調和振動子を使う。ハミルトニアンを

$$H = \frac{1}{2}(p^2 + q^2) + \frac{1}{3}aq^3 \quad (\alpha \text{ は可変定数})$$

として初期値 $q_0 = 1.0$, $p_0 = 0.0$ を与え Runge-Kutta 法と Symplectic 法で計算を行なう。精度のよい 6 次の Runge-Kutta 法であるが h^7 程度の誤差を生じさせる²⁾。誤差の絶対値は解く方程式によって変わるが、いずれにせよ長時間積分の結果の信頼性が損なわれる。つまりハミルトン系にもかかわらずエネルギーが保存しないことが起こる。

図 1 は Runge-Kutta 法での調和振動子 ($\alpha = 0.0$) の解で真値からの誤差を出したものである。具体的に言うと真値の場合はトラジェクトリーの半径が 1 の円なので $e(\text{誤差}) = 1.0 - \sqrt{q^2 + p^2}$ と求める。 q と p は 5000 点ごとの Runge-Kutta 法の計算値とする。刻みは $h = 0.10$, $h = 0.08$ と比較的大きいが、単調に誤差が増加することがわかる。

一方 Symplectic 数値解法は保存則は破らないが刻みが大きくなるにつれて、真の軌道からのずれを生じさせる。

図 2, 3, 4 はそれぞれ Symplectic 解法 1 次, 2 次, 4 次の刻みを変えた場合の $\alpha = 0.4$ のときの位相図である。

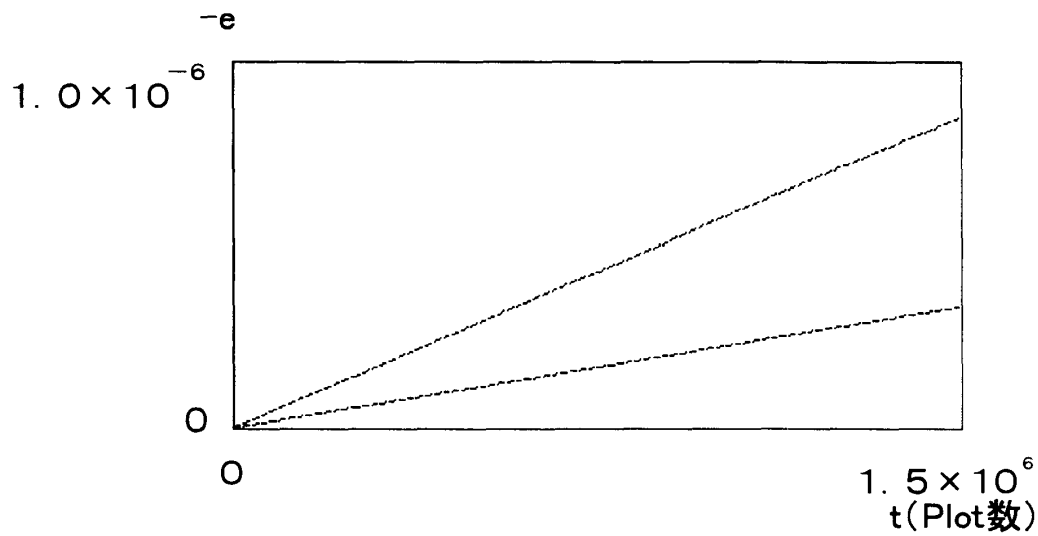


図1 Runge-Kutta 法による誤差

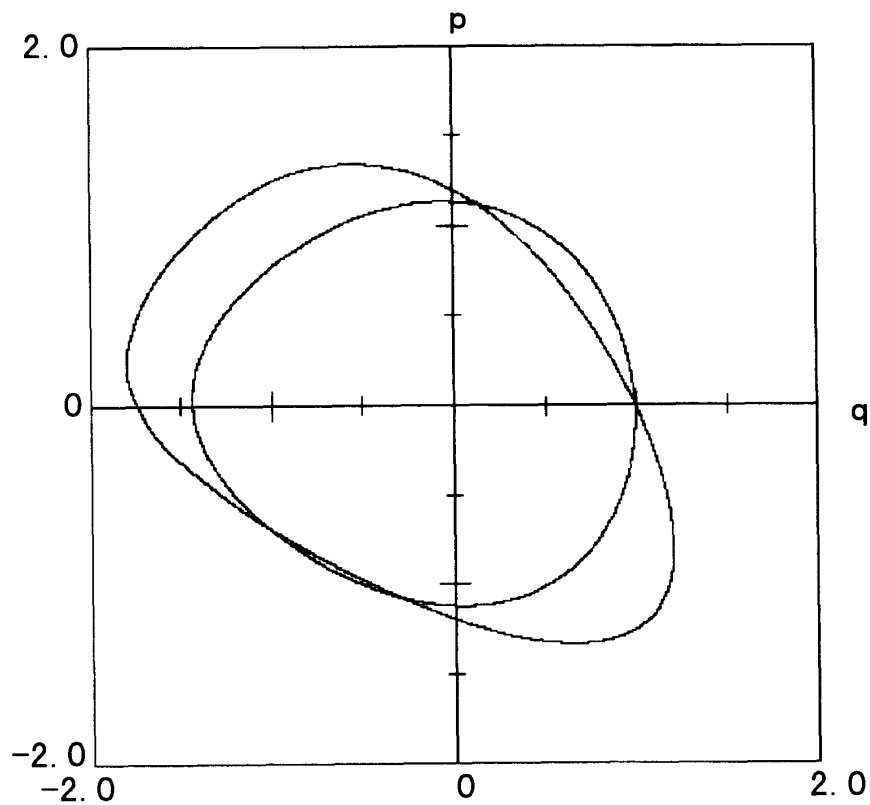


図2 Symplectic 解法 (1次)
 内側: $\tau = 0.10$ 外側: $\tau = 0.90$

特徴は、1次、2次は、刻みを大きくすることによってエネルギー値が大きくなるが4次は小さくなる。ここでも非線形方程式を解く場合、線形を解くよりも誤差が大きくなる。また刻みが0.1の場合、2次と4次の位相図はほぼ同じで、1次は若干ずれている程度であった(図は省略)。よって刻みと次数は方程式によって変えればよい近似が得られること

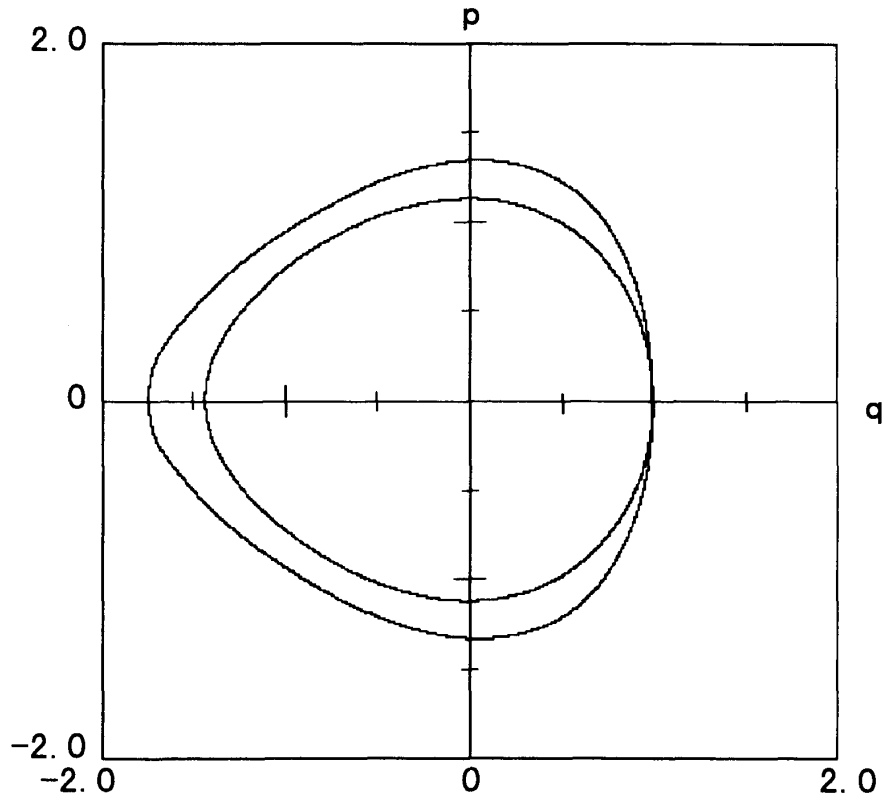


図3 Symplectic 解法 (2次)
内側： $\tau = 0.10$ 外側： $\tau = 0.90$

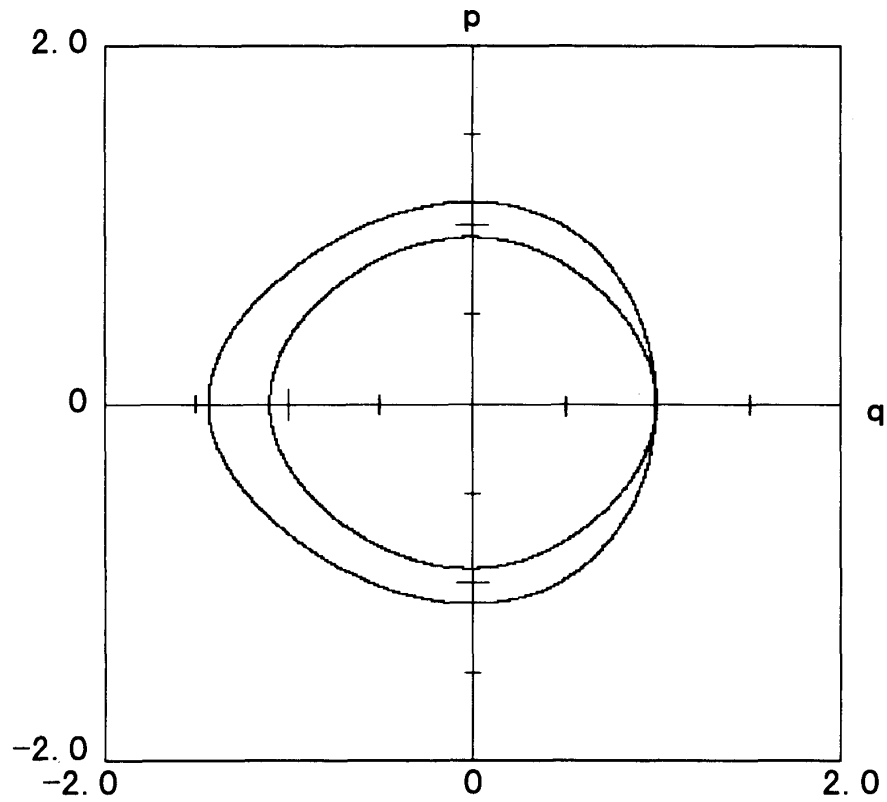


図4 Symplectic 解法 (4次)
内側： $\tau = 0.90$ 外側： $\tau = 0.10$

がわかった。

3. Hénon-Heiles 系における Symplectic 数値解法

Hénon-Heiles 系のハミルトニアン,

$$H = \frac{1}{2}(\dot{q}_2^2 + \dot{q}_3^2) + \frac{1}{2}(q_2^2 + q_3^2) + q_2^2 q_3 - \frac{1}{3} q_3^3$$

について Runge-Kutta 法と 1 次の Symplectic 解法との計算の速度の比較, その他 Symplectic 解法による結果の特徴を調べてみる。解軌道のポアンカレ写像で大域的な運動を予測する。プログラムは $q_2, q_3, \dot{q}_2, \dot{q}_3$ でつくられる 4 次元空間内で $q_2 = 0$ の平面を解の軌道が横切るとき, $\dot{q}_2 > 0$ の条件が満たされている場合に q_3 と \dot{q}_3 の値を $q_3 - \dot{q}_3$ 面上にプロットさせるように作る。

図 5 は $H = 1/7$ の条件で刻み 0.001, 1 次の Symplectic 解法で描かせた図であるがおよその図は描けている³⁾。特定の数までプロットする速さは上で示した同じ条件では Runge-Kutta 法が 1 次の Symplectic 法に比べて約 15 倍の速さであったが, この結果が何を示しているかという点, ここで使っている Symplectic 解法が離散的な近似解法であるためと思われる。従って Symplecticity を保つ解法の中で離散的な方法はポアンカレ写像の図を描くには向いていないと言える。

4. 散逸系における数値解法

Symplectic 型数値解法は本来保存系における数値計算法であるが, Symplectic 写像の陽的解法から類推した方法を取り, 厳密解がわかっている減衰振動型散逸系に適用してみ

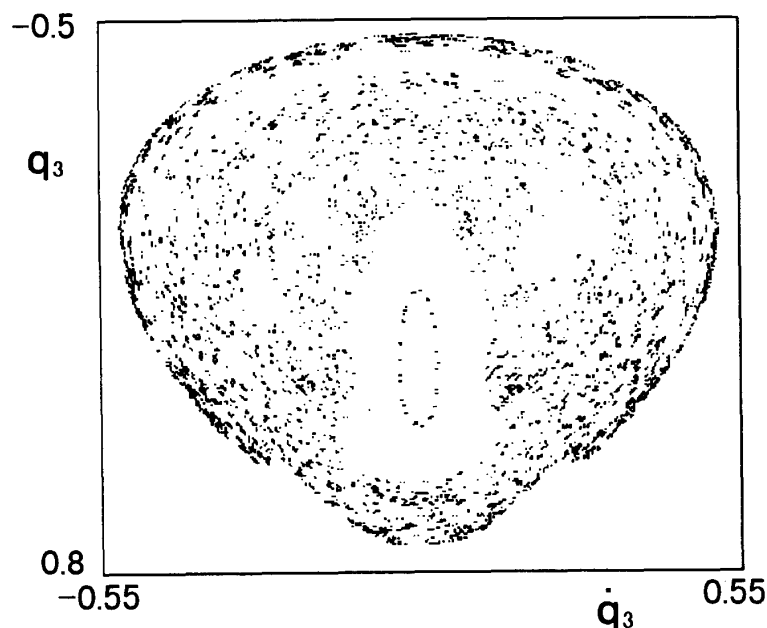


図 5

る。

連立微分方程式

$$\begin{cases} \dot{x} = y \\ \dot{y} = -2\gamma y - \omega^2 x \end{cases} \quad (1)$$

における parameter ω, γ を $\omega^2 > \gamma^2$ として厳密解, Euler 法, 擬 Symplectic 解法 1 次及び 2 次の結果を比較する。

まず Euler 法による写像 $(x, y) \rightarrow (x', y')$ であるが τ を時間刻みとして(1)式を次のように離散化する。

$$\begin{cases} x' = x + \tau y \\ y' = y - \tau(2\gamma y - \omega^2 x) \end{cases} \quad (2)$$

次に(1)の x と y をそれぞれ位置と運動量とみなして, (1)を正準方程式と仮定し 1 次の擬 Symplectic 解法を

$$\begin{cases} x' = x + \tau y \\ y' = y - \tau(2\gamma y - \omega^2 x') \end{cases} \quad (3)$$

とする。これは Symplectic 多様体上での合成写像から類推して

$$(x, y) \longrightarrow (x', y) \longrightarrow (x', y')$$

を表しているので, ここからハミルトニアンは構成できない。(3)式は Lie 変換から導かれたものではなく, 陽的解法の Symplectic 写像から類推して導いたものである。2 次の陽的解法により 2 次の擬 Symplectic 解法は

$$\begin{cases} x^* = x + \frac{\tau}{2} y' \\ y' = y - \tau(2\gamma y + \omega^2 x^*) \\ x' = x^* + \frac{\tau}{2} y' \end{cases} \quad (4)$$

と与えられる。従ってそれぞれの写像の係数行列式は

$$\left. \begin{array}{l} \text{Euler 法} \quad \quad \quad : 1 - 2\tau\gamma + \tau^2\omega^2 \\ \text{擬 Symplectic (1 次)} : 1 - 2\tau\gamma \\ \text{擬 Symplectic (2 次)} : 1 - 2\tau\gamma \end{array} \right\} \quad (5)$$

となり擬 Symplectic 写像は 1 次, 2 次とも写像ごとに $(1 - 2\tau\gamma)$ 倍される¹⁾。

図 6, 7, 8, 9, 10(実線: 厳密解, ○: 擬 Symplectic 1 次, ●: 擬 Symplectic 2 次, △: Euler) は, $\tau = 0.001, \omega = 0.10, \gamma = 0.05$ の減衰振動におけるそれぞれの解法の拡大図で

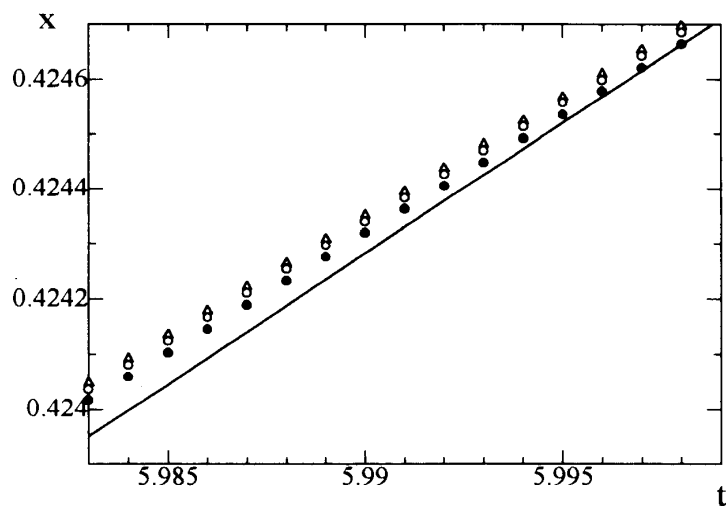


図 6

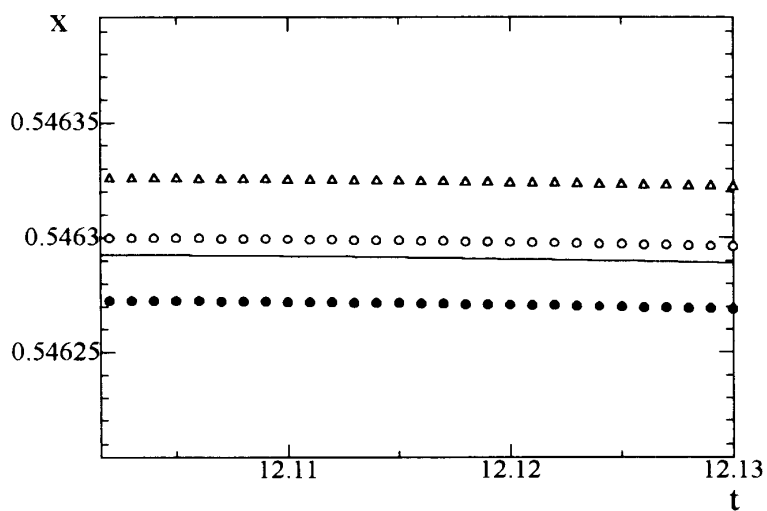


図 7

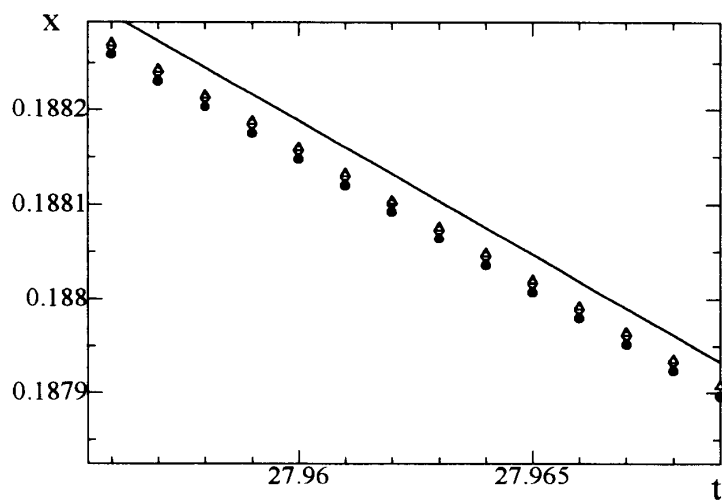


図 8

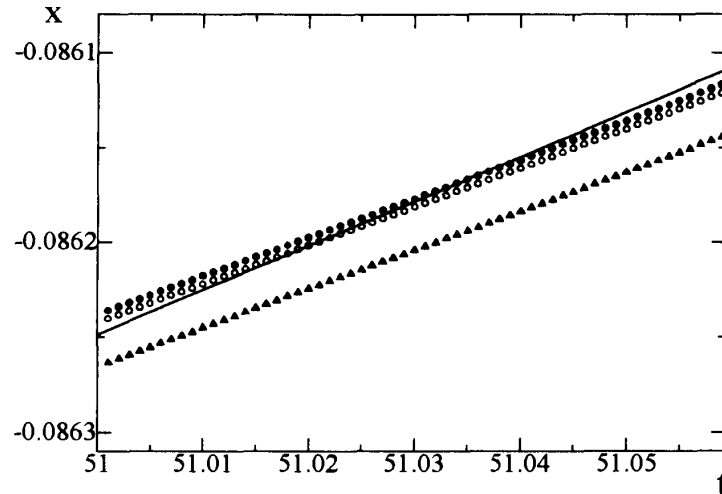


図 9

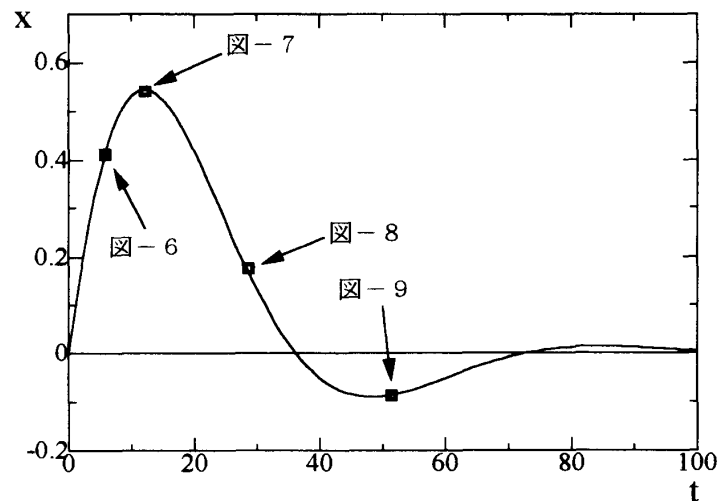


図10

ある。Euler 法より擬 Symplectic 解法の方が、わずかではあるが良いとみえる。図 6 では、2 次の擬 Symplectic 解法が厳密解に一番近く、図 7 では、1 次の擬 Symplectic 解法の方が近い。図 8 になると 3 つともあまり近似が良くない。図 9 では、Euler 法の誤差が蓄積しているのがわかる。図 10 では拡大図のそれぞれの位置を示す。この実験からでは、はっきりした傾向はわからないが、図 11 (実線：厳密解，破線：擬 Symplectic 1 次，1 点鎖線：Euler) は、より擬 Symplectic 解法を特徴づけている。この図は、刻みを 1.0 としたときの Euler 法，擬 Symplectic 解法の 1 次と 2 次，それと厳密解を比較した図である。

普通の数値積分では、それほど大きな刻みにしないが、特徴を示すため敢えて大きくとった。厳密解からみてみると、Euler 法は、刻みの大きさに対して不安定であることが言えるが、擬 Symplectic 解法は、比較的安定している。刻みが大きければ、計算時間は早

いが結果が不正確になりやすい。逆に小さくし過ぎると時間がかかり、丸め誤差の蓄積が問題になる。このことから、擬 Symplectic 解法でも、あまり刻みを小さくする必要がないことがわかる。

次に擬 Symplectic 解法 1 次と 2 次との違いを検討する。表 1 は、刻みを全て 0.01 とし、 t の値が整数のときだけで 30 から 50 まで表示した。大まかに結果を見ていくと、全体的に 2 次の方が良い。しかし、Runge-Kutta 型のように、方程式の解の真値に近づけて

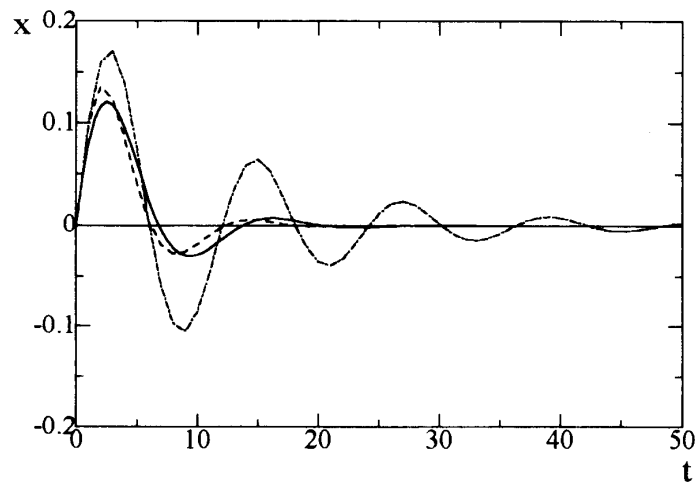


図11

表 1

t	x			
	厳密解	オイラー法	擬シンプレクティック(1次)	擬シンプレクティック(2次)
30	1.33242644017689E-01	1.33223989237318E-01	1.33227542892646E-01	1.33220881182433E-02
31	1.08125821039739E-01	1.08104675312606E-01	1.08111203781047E-01	1.0810579795058 E-01
32	8.43710835888406E-02	8.43477174821123E-02	8.43571079426224E-02	8.43528898763328E-02
33	6.20746800184086E-02	6.20493774680642E-02	6.20614871843935E-02	6.20583839548804E-02
34	4.13098331172587E-02	4.12828871648813E-02	4.1297546886795 E-02	4.12954819062067E-02
35	2.2128235055439 E-02	2.20999437631868E-02	2.21169612679431E-02	2.21158553645869E-02
36	4.56160478711273E-03	4.53226737056742E-03	4.55143108309172E-03	4.55120350015866E-03
37	-1.13767128409929E-02	-1.14067996291383E-02	-1.13857169943226E-02	-1.13851476800088E-02
38	-2.56901254493145E-02	-2.57206706578171E-02	-2.56979084849358E-02	-2.56966235252669E-02
39	-3.83971665166367E-02	-3.84278880355124E-02	-3.8403694273085 E-02	-3.84017739923622E-02
40	-4.95298797418887E-02	-4.95605070280933E-02	-4.95351347733661E-02	-4.95326578927896E-02
41	-5.91322286945866E-02	-5.91625051734994E-02	-5.91362094121839E-02	-5.91332524538728E-02
42	-6.72585444689588E-02	-6.72882296065455E-02	-6.72612641390374E-02	-6.72579009076774E-02
43	-7.39720224854474E-02	-7.40008935305461E-02	-7.39735081106376E-02	-7.39698092502986E-02
44	-7.93432780555031E-02	-7.93711314558369E-02	-7.93435691629296E-02	-7.93396017861131E-02
45	-8.34489688517774E-02	-8.34756213510426E-02	-8.34481162120455E-02	-8.3443943597615 E-02
46	-8.63704910148317E-02	-8.63957804415321E-02	-8.63685553140492E-02	-8.63642366703624E-02
47	-8.81927542867731E-02	-8.82165400483735E-02	-8.81898047724631E-02	-8.81853950617503E-02
48	-8.9003040297846 E-02	-8.90252035962913E-02	-8.89991534180658E-02	-8.89947032378974E-02
49	-8.88899469487198E-02	-8.8910390735438 E-02	-8.88852050020681E-02	-8.88807605196055E-02
50	-8.79424207325473E-02	-8.7961069422722 E-02	-8.79369105450411E-02	-8.79325134796721E-02

いくと言うよりも、全体のエネルギー、すなわち物理現象を良く近似しているようだ。言い換えると数学的には評価が低いが、物理の数値計算として意味のあるアルゴリズムといえる。今後、より高次の解法との関連も検討していくが、擬 Symplectic 法も Symplectic 法と同様に運動の性質を近似できるので、散逸系にも何らかの有効性を示しているといえる。

5. 考察及び課題

Symplectic 数値解法の特徴として一番重要なことは保存系における長時間の積分の信頼性である。特に非線形方程式では、顕著に現われる。しかし、その他の数値解法が劣っているというのではなく、Symplecticity を保つことが運動方程式を解く際に、どのような影響を与えるかということ、それと、この数値計算法の使い方を吟味するのが重要である。

一連の実験結果と、その他ここで示せなかった、シミュレーション結果から総合的にいえることは、Symplectic 型数値解法は、積分不能であるハミルトニアン、特に長時間の分析に使われるべきである。と言うのは、カオスともなると代数的な近似計算では予測できない場合もあり、また初期値に鋭敏な反応をする系だからである。また、長時間の積分が系に与える影響も大変重要で、これは、 10^{15} 秒以上にわたる時間スケールでの分析では、図 1 から類推できるように Runge-Kutta 法ではまったく役に立たない⁴⁾。また汎用性についてだが、今回使った陽的離散型 Symplectic 解法は、3 章のような目的、つまり早く奇麗にポアンカレの写像を描くことには、必ずしも優れていない。しかし Symplecticity 保存は一般性の強い条件であるため Symplecticity を保ちながらアルゴリズムを変える方法を用いれば、もっと広く使えるだろう。アルゴリズムとの関係についても調べる必要がある。

今回、実験的に行なった散逸系への適用であるが、(5)式などの結果から散逸系へ使った計算アルゴリズムに位相空間の幾何学との関連が予想出来る。このことは、Euler 法や Runge-Kutta 法では q と p に何も相関がないため、 q と p のそれぞれの誤差の積が計算ごとに蓄積していつていることと対照的である。今のところ散逸系に陽的 Symplectic 解法のアルゴリズムを適用する利点はわからないが、近似理論を使った分析を待つしかない。今後の課題は散逸系のカオスに適用することである。

参考文献

- 1) 木村利栄・菅野礼司著、微分形式による解析力学 (マグロウヒル)
大貫義郎・吉田春夫著、力学 (岩波書店)
吉田春夫, 数理科学 No. 384, June (1995) 37-46.
平田光司, 数理科学 No. 384, June (1995) 54-39.
- 2) D. Sarafyan, Journal of Math. Analysis and Appli. **40**, 436-445 (1972).
- 3) 渡辺慎介著、一般力学入門 (培風館)
- 4) 木下 宙・中井 宏, 吉田春夫, 数理科学 No. 384, June (1995) 47-53.

Application to the Dissipative System and Chaos with Symplectic Numerical Solution

Kazuo ISHII, Hironori SHIMOYAMA and Naoya SHIRAHAMA

Department of Applied Physics,

Faculty of Science,

Okayama University of Science,

Ridai-cho 1-1, Okayama 700, Japan

(Received September 30, 1995)

It is known that the symplectic method does not give rise to the truncation error. Then, we apply to the dissipative and complicated system, and verify the flexibility of the algorithm. As a result, our demonstration indicates that the symplectic type is more stable.