

Hamilton力学系に対する数値解法

名大工 齋藤 理史
三井 斌友

近年、天体物理学、非線形物理学などの分野にあらわれる微分方程式を、長時間にわたって数値積分する場合、その累積誤差が問題になってきている。そこで、微分方程式が由来する系の定性的性質に立ち戻って、その系にある固有の保存量を再現する数値解法が望まれる。

本論文では、力学系、特にHamilton系の物理現象を記述する微分方程式に対して、エネルギーや、symplectic structureなどの系固有の保存量を再現する数値解法について考察する。

1. Hamilton力学系

Hamilton系では物理現象の状態は、位置 q 、運動量 p を用いた (p, q) 空間（位相空間）の一点で表わされる。 p, q が n 次元実ベクトルであるとき、位相空間は $2n$ 次元になる。このとき、Hamiltonianと呼ばれる、その物理現象に固有の函数 $H(p, q)$ を前提とし、これを用いて、状態の時間変化は、

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

として表わされる。これらをHamiltonの正準方程式ということは良く知られている。

力学系のsymplectic structureとは、位相空間の2次微分形式 $\omega^2 = dp \wedge dq$ と定義され、 $d\omega^2 = 0, \omega^2 \neq 0$ をみたす。すなわち、直観的には位相空間の微小体積を表わしてゐる。

この2次微分形式を保存する、位相空間からそれ自身の上への写像を正準写像

(canonical mapping)と呼ぶ。例えば、時間の流れ (time flow)の写像 g_t

$$g_t : (p(0), q(0)) \mapsto (p(t), q(t))$$

は正準変換である。この写像により位相空間内の体積 (phase volume)は保存される。

また、位置 q 、運動量 p の函数 $f(p, q)$ の時間変化は、

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial q} \cdot \frac{dq}{dt} + \frac{\partial f}{\partial p} \cdot \frac{dp}{dt} = \frac{\partial f}{\partial q} \cdot \frac{\partial H}{\partial p} - \frac{\partial f}{\partial p} \cdot \frac{\partial H}{\partial q} + \frac{\partial f}{\partial t}$$

$$= \{H, f\} + \frac{\partial f}{\partial t}$$

$\{\cdot, \cdot\}$ は Poisson 括弧式である。ここで、上の正準方程式を用いた。特に Hamiltonian $H(p, q)$ が時間を陽に含まない場合、 $f = H$ とおけば分かるように、

$$\begin{aligned} \frac{dH}{dt} &= \{H, H\} \\ &= 0 \end{aligned}$$

となる。この場合、Hamiltonian $H(p, q)$ が保存されることを示している。即ちこの場合 Hamiltonian はエネルギーの意味を持つ。

2. Hamilton系に対する数値解法

2-1 Symplectic structureを保存する数値解法

Hamilton系の微分方程式に対して、symplectic structureを保存する数値解法の条件を調べる。(このような数値解法をsymplecticな数値解法と呼ぶことにする。)

特に IRK法 (implicit Runge-Kutta method) に対し考察する。IRK法は、一般の微分方程式

$$\frac{dy}{dt} = f(t, y)$$

に対し、

$$\begin{cases} y_{i+1} = y_i + h\phi(t_i, y_i, h) & h = t_{i+1} - t_i \\ \phi(t_i, y_i, h) = \sum_{j=1}^s b_j k_j \\ k_j = f(t_i + c_j h, y_i + h \sum_{l=1}^s a_{jl} k_l) & j = 1, \dots, s \end{cases}$$

によって、 (t_i, y_i) から (t_{i+1}, y_{i+1}) の値を決める。また、パラメータは、

$$c_j = \sum_{l=1}^s a_{jl}, \quad \sum_{j=1}^s b_j = 1$$

の条件を満たすものとする。以下、記号、

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1s} \\ \vdots & & & \vdots \\ \vdots & & & \vdots \\ a_{s1} & \cdots & \cdots & a_{ss} \end{bmatrix} \quad c = \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_s \end{bmatrix}$$

$$B = \begin{bmatrix} b_1 & & & \\ & b_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & b_s \end{bmatrix} \quad b = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_s \end{bmatrix}$$

を導入する。IRK法に対しては、Butcherのダイアグラムがよく用いられる。即ち、

$$\begin{array}{c|c} c & A \\ \hline & b^T \end{array}$$

ここで、IRK法の代数的安定性の定義にあらわれる行列 M

$$m_{ij} = b_i a_{ij} + b_j a_{ji} - b_i b_j \quad i, j = 1, \dots, s$$

$$M = BA + A^T B - bb^T$$

に関してsymplecticな数値解法に対する十分条件が知られている。

定理1 (Sanz-Serna, 1988)

$M = 0$ ならば、IRK法はsymplecticである。

2-2 エネルギー保存の数値解法

具体的な力学の問題では、Hamiltonian $H(p, q)$ が p, q の2次形式で書かれることが多いので、ここでは2次形式の保存される数値解法について考える。

ここでも、先ほどと同様に行列 M の条件を示す定理が証明されている。

定理2 (Cooper, 1987)

$M = 0$ ならば、IRK法は自励系

$$\frac{du}{dt} = f(u)$$

の解 u の2次形式の任意の第一積分を保存する。

以上2つの定理は、IRK法によってsymplectic structureやエネルギー（2次形式の第一積分）を保存するためには、 $M = 0$ が十分条件であることを主張している。IRK法の代数的安定性は $M \geq 0$ として定義されているので、それよりきびしい条件であることに注目しよう。

3. Numerical implementation

$M = 0$ のIRK法を、非線形Schrödinger方程式に適用する。

3-1 非線形Schrödinger方程式(NLS)

非線形Schrödinger方程式はプラズマ中を伝わるイオン音波を記述するものとして知られており、適当な初期・境界条件のもとではソリトン解を持つことが知られている。

ソリトンは非線形波動で、(a) 孤立波で、振幅の大きいものは速度が大きく (b) 相互作用によりそれぞれの波の振幅、幅、速度などを保存する という性質を持つ。これらのこと

から、孤立波の振る舞いが粒子のようであるので、solitary wave の粒子

(electron, protonの語尾のように-onをつける) という意味でsolitonと呼ばれる。

非線形Schrödinger方程式のHamiltonianは、

$$\int_{-\infty}^{\infty} (\bar{\phi}_x \cdot \phi_x + c|\phi|^4) dx$$

と書かれ、正準方程式、即ち非線形Schrödinger方程式は、

$$i\phi_t + \phi_{xx} + q|\phi|^2\phi = 0, (-\infty < x < +\infty, t \geq 0)$$

$$\phi(x, 0) = g(x) \quad (-\infty < x < +\infty)$$

である。

この方程式は $q=0$ の場合は、線形な方程式（自由粒子のSchrödinger方程式）に帰着し、その解は

$$\phi(x, t) = \exp\{i(kx - \omega t)\} \quad \omega = k^2$$

である。速度は波数 k に依存するので時間がたつと広がっていく波を表わす。従って、初期状態がいろいろな波数を含んだ解（重ね合わせの解）であるなら、それぞれのモードに対して速度が異なるため、時間がたつにつれて広がっていく、分散のある波を表わす。これに対して、 $q \neq 0$ のときは非線形項が分散を抑え、結果としてソリトン解になると解釈できる。

(i) 1-ソリトン解

1-ソリトン解は、

$$\phi(x, t) = \sqrt{2\alpha/q} \exp\left[i\left\{cx/2 - (c^2/4 - \alpha)t\right\}\right] \operatorname{sech}\left\{\sqrt{\alpha}(x - ct)\right\}$$

と表わされる。 c は速度を表わす。

このとき初期値は、

$$g(x) = \phi(x, 0) = \sqrt{2\alpha/q} \exp(icx/2) \operatorname{sech}(\sqrt{\alpha}x)$$

(ii) 2-ソリトン解

2-ソリトン解は2つのソリトンをもつ解で、その存在は知られているが、2つのソリトンが十分離れている場合の初期値は、近似的に1-ソリトン解の線形結合

$$g(x) = \sqrt{2\alpha/q} \left\{ \exp(ic_1x/2) \operatorname{sech}(\sqrt{\alpha}x) + \exp\left[ic_2(x - \delta)\right] \operatorname{sech}(\sqrt{\alpha}(x - \delta)) \right\}$$

とみることができる。ここで c_1, c_2 はそれぞれのソリトンの速度、 δ は初期状態の2つのソリトンの間の距離を表わす。2つのソリトンが時間がたつにつれ近づき、衝突し、形や速度を変えずに通過する。また、この系には保存量が無限個存在し、そのうち解の2次形式とみることのできるものは、

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\phi|^2 dx$$

である。

2-ソリトンの場合の数値解を求めよう。まず方程式を空間離散化し、時間についての常微

分方程式系にし、これにIRK法を適用する。

3-2 空間離散化

(a) Sanz-Serna, Verwer (1986) の空間離散化

方程式の解は、ソリトンであるので、 $x_l \leq x \leq x_r$ の外では解の変動が無視できるほど小さいとみなすことができる。このため、非線形Schrödinger方程式は、初期値・境界値問題

$$\begin{aligned} i\phi_t + \phi_{xx} + q|\phi|^2\phi &= 0, \quad (-\infty < x < +\infty, t \geq 0) \\ \phi(x, 0) &= g(x) \quad (x_l \leq x \leq x_r) \\ \phi_x &= 0 \quad (x = x_l, x_r, 0 < t \leq T) \end{aligned}$$

のように書き換えられる。

解は、複素関数なので実部、虚部に分けて、

$$\begin{aligned} \phi &= v + iw \\ \begin{cases} v_t + w_{xx} + q(v^2 + w^2)w = 0 \\ w_t - v_{xx} - q(v^2 + w^2)v = 0 \end{cases} & \quad (x_l \leq x \leq x_r, 0 \leq t \leq T) \\ v(x, 0) = g_r(x), w(x, 0) = g_i(x) & \quad (x_l \leq x \leq x_r, g(x) = g_r(x) + ig_i(x)) \\ v_x = w_x = 0 & \quad (x = x_l, x_r, 0 \leq t \leq T) \end{aligned}$$

これを、2階微分には中心差分を用い、空間離散化を行う。

$$\begin{aligned} h &= (x_r - x_l) / (N + 1), \quad x_j = x_l + jh; j = 1(1)N \\ v_j &= v(x_j, t), \quad w_j = w(x_j, t) \end{aligned}$$

として、

$$\begin{aligned} \dot{v}_j + h^{-2}(w_{j+1} - 2w_j + w_{j-1}) + q(v_j^2 + w_j^2) &= 0 \\ \dot{w}_j - h^{-2}(v_{j+1} - 2v_j + v_{j-1}) - q(v_j^2 + w_j^2) &= 0 \end{aligned}$$

を得る。ドットは時間に関する微分を表わす。境界条件より、

$$v_0 = v_2, w_0 = w_2, v_{N+1} = v_{N-1}, w_{N+1} = w_{N-1}$$

また、

$$u_j = [v_j, w_j]^T, \quad u = [u_1^T, \dots, u_N^T]^T$$

とおくと、

$$\dot{u} = p(u)u = [S + B(u)]u$$

と表わすことができる。

ここで、 S はブロック三重対角行列で

$$S = -h^{-2} \begin{bmatrix} -2A & 2A & & & \\ & A & -2A & A & \\ & & & \ddots & \\ & & & & A & -2A & A \\ & & & & & 2A & -2A \end{bmatrix} \quad A = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix}$$

$B(u)$ はブロック対角行列、

$$B(u) = -q \begin{bmatrix} B_1(u_1) & & & & \\ & B_2(u_2) & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & \ddots & \\ & & & & B_N(u_N) \end{bmatrix}$$

である。内積を、

$$\langle u, \tilde{u} \rangle = h \left(\frac{1}{2} u_1^T \tilde{u}_1 + \sum_{j=2}^{N-1} u_j^T \tilde{u}_j + \frac{1}{2} u_N^T \tilde{u}_N \right)$$

と定義すると

$$\langle Su, u \rangle = 0 \quad \langle B(\tilde{u})u, u \rangle = 0$$

が容易に示される。これより、エネルギー、

$$E = \int_{-\infty}^{\infty} |\phi|^2 dx \equiv \langle u, u \rangle$$

の時間変化は、

$$\begin{aligned} \frac{dE}{dt} &\equiv \frac{d}{dt} \langle u, u \rangle = 2 \langle \dot{u}, u \rangle \\ &= 2 \langle Su + B(u)u, u \rangle \\ &= 2 \langle Su, u \rangle + 2 \langle B(u)u, u \rangle \\ &= 0 \end{aligned}$$

つまり、この空間離散化によりエネルギーは保存される。

(b) Shamardanの空間離散化

Sanz-Serna, Verwerらの空間離散化は $O(h^2)$ であったが、Shamardan は $O(h^4)$ の離散化を行った。彼等と同様に $[x_p, x_r]$ の区間外での解の変動を無視している。初期境界条件などは、(a)と同じにとっている。

$$i(\dot{u}_{j+1} + 10\dot{u}_j + \dot{u}_{j-1}) + 12h^{-2}(u_{j+1} - 2u_j + u_{j-1}) + q(|u_{j+1}|^2 u_{j+1} + 10|u_j|^2 u_j + |u_{j-1}|^2 u_{j-1}) = 0$$

境界条件より、

$$u_0 = u_2, \quad u_{N+1} = u_{N-1}$$

(a)と同じように実部、虚部分け、

$$u_j = v_j + iw_j$$

$$u_j = [v_j, w_j]^T, \quad u = [u_1^T, \dots, u_N^T]$$

として、

$$P\dot{u} = [S + PQ(u)]u$$

ただし、

$$P = \begin{bmatrix} 5I & I & & & \\ & I & 10I & I & \\ & & & \ddots & \\ & & & & I & 10I & I \\ & & & & & I & 5I \end{bmatrix} \quad I = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$S = -12h^{-2} \begin{bmatrix} -A & A & & & \\ A & -2A & A & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & A & -2A & A \\ & & & A & -A \end{bmatrix} \quad A = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix}$$

$$Q(u) = -q \cdot \text{diag}[e_1 A, \dots, e_N A] \quad e_j = v_j^2 + w_j^2$$

内積はSanz-Serna, Verwerと同じ定義を用い、

$$\langle P^{-1}Su, u \rangle = 0, \quad \langle Q(u)u, u \rangle = 0$$

となるので、エネルギー保存が成り立つ空間離散化になっている。

3-3 時間についての積分

空間離散化を行った方程式を時間についての常微分方程式とみなし、積分する。このとき、 $M=0$ のIRK法のうち、1段2次、2段4次のGauss-Legendre型公式を適用する。Sanz-Serna, Verwerの空間離散化に対しては1段2次（陰的 midpoint 則）、2段4次（Butcher公式）、Shamardanの空間離散化に対しては1段2次公式を用いた。各々のButcherのダイアグラムは、

$$\begin{array}{c|c} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \hline & 1 \end{array} \quad \begin{array}{c|cc} \frac{1}{2} - \frac{\sqrt{3}}{6} & \frac{1}{4} & \frac{1}{4} - \frac{\sqrt{3}}{6} \\ \hline \frac{1}{2} + \frac{\sqrt{3}}{6} & \frac{1}{4} + \frac{\sqrt{3}}{6} & \frac{1}{4} \\ \hline & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{array}$$

(a) Sanz-Serna, Verwerの方法（1段2次公式）

$$u^{n+1} = u^n + \tau P \left(\frac{u^n + u^{n+1}}{2} \right) \cdot \left[\frac{u^n + u^{n+1}}{2} \right]$$

これをNewton反復法で解く。そのJacobi行列は帯幅7の帯行列で、Newton反復の修正量

を求めるには、帯行列に対するGauss消去法を使った。

(b) Shamardanの方法 (1段2次公式)

$$P[u^{n+1} - u^n] = \tau[S + PQ(\frac{u^{n+1} + u^n}{2})][\frac{u^{n+1} + u^n}{2}]$$

これに対してもNewton反復法を用いて解く。そのJacobi行列は帯幅7の帯行列である。

(a)と同様Newton反復の修正量を求めるには、帯行列に対するGauss消去法を使った。

(c) Sanz-Serna, Verwerの方法 (2段4次)

$$u^{n+1} = u^n + \frac{\tau}{2}(k_1 + k_2)$$

$$k_1 = P(u^n + \frac{1}{4}\tau k_1 + (\frac{1}{4} + \frac{\sqrt{3}}{6})\tau k_2)[u^n + \frac{1}{4}\tau k_1 + (\frac{1}{4} + \frac{\sqrt{3}}{6})\tau k_2] = f_1$$

$$k_2 = P(u^n + (\frac{1}{4} - \frac{\sqrt{3}}{6})\tau k_1 + \frac{1}{4}\tau k_2)[u^n + (\frac{1}{4} - \frac{\sqrt{3}}{6})\tau k_1 + \frac{1}{4}\tau k_2] = f_2$$

ここで、 k_1, k_2 についてNewton反復法を用いる。そのとき2つの方法が考えられる。

(i)

$$k = [k_{11}^T, k_{12}^T, \dots, k_{12N-1}^T, k_{12N}^T, k_{21}^T, k_{22}^T, \dots, k_{22N-1}^T, k_{22N}^T]^T$$

$$F = [f_{11}^T, f_{12}^T, \dots, f_{12N}^T, f_{21}^T, \dots, f_{22N}^T]^T$$

と並べて、

$$k - F(k) = 0$$

を解く。

(ii)

$$k = [k_{11}^T, k_{21}^T, \dots, k_{12N}^T, k_{22N}^T]^T$$

$$F = [f_{11}^T, f_{21}^T, \dots, f_{12N}^T, f_{22N}^T]^T$$

と並べて

$$k - F(k) = 0$$

を解く。

(i)の方法のJacobi行列は、

$$J = I - A \otimes B$$

と書けることがわかる。その構造は帯幅5の帯行列をブロックとし、そのブロックが縦あるいは横に4つ並ぶものである。この行列はsparseであるが、帯行列でないためNewton反復の修正量を求める際、sparsenessを利用しないGauss消去法を用いると計算時間が膨大となる。一方、(ii)の方法は方程式の順序を単に並び換えたことに対応していて、そのJacobi行列は、

$$J = I - B \otimes A$$

と書ける。これは、帯行列になる。基本置換行列の積を用い、(i)、(ii)のJacobi行列 J_1 、 J_2 は

$$J_2 = PJ_1P^{-1}$$

で表わされる。したがって、解くべき方程式、

$$J_1x = b$$

は、

$$PJ_1P^{-1}Px = Pb$$

つまり、

$$J_2y = c$$

となる。3番目の方法(iii)として、Jacobi行列を調べてみると、

$$J = I + R$$

と表わされるから R のスペクトル半径を1より小さくして、

$$Jx = (I + R)x = b$$

を解くのを、

$$x = -Rx + b$$

なる線形反復によって解くことが考えられる。これは、 $\frac{\tau}{h^2} < 1$ ならば十分である。

これら三つの方法についての計算時間の比較を行った。計算機は名古屋大学大型計算機センターFACOM VP200を用いた。

(1) Newton反復の収束判定 10^{-6} の場合

(単位：msec)

N	(i)	(ii)	(iii)
128	16200	49	30
256	119100	106	201
512	-	219	-
1024	-	578	-

(2) Newton反復の収束判定 10^{-12} の場合

(単位：msec)

N	(i)	(ii)	(iii)
128	21500	64	63
256	158000	136	995
512	-	293	-
1024	-	586	-

以上より(ii)の方法が一番良い方法と思われる。このことから、中心差分を用いた空間離散化による常微分方程式系にIRK法を適用する場合、 $M = 0$ を満たす強いimplicitnessをもつ方法を使わなければならないが、そこでは内部反復を(ii)のような方法で行うと効率が格段に違うことが示唆される。

今後の課題として、IRK方によって、非線形Schrödinger方程式の他の保存量を求めること、また、他のsymplecticな方法の研究などがあげられる。

References

1. G. J. Cooper, Stability of Runge-Kutta methods for trajectory problems, *IMA J.Numer.Anal.*, 7(1987) 1-13.
2. J.M.Sanz-Serna, Runge-Kutta schemes for Hamiltonian systems, *BIT*, 28 (1988)877-883.
3. J.M.Sanz-Serna and J.G.Verwer, Conservative and nonconservative schemes for the solution of the nonlinear Schrödinger equation, *IMA J.Numer.Anal.*, 6(1986) 25-42.
4. A.B.Shamardan, The numerical treatment of the nonlinear Schrödinger equation, *Computers Math.Applic.* 19 (1990)67-73.