

可逆な Runge-Kutta 公式と symplectic 性

徳島大・総合科学 前田 茂 (Shigeru Maeda)

1 初めに

symplectic 写像の応用範囲は広範であるが、Hamilton 系の数値積分に用いる、いわゆる Symplectic Integrator(以後、SIA と略称)は最も重要かつ実用度の高い応用の1つである。元来、SIA は原子核物理学、天体力学など、比較的限定された分野で用いられてきたが、長時間走行や軌道相全般の数値的再現性に優れていることが、経験的に知られていた。SIA の構成は、正準変換理論で知られる母関数に基づくものや指数写像に基づくものが主流であったが、長所の反面、前者は汎用性と高次数化との間に trade-off が存在し、後者は適用対象が separable 系であるという使用上の難点があった。ところが、近年 Sanz-Serna によって、汎用性を持つ Runge-Kutta (以下、RK と略称する)公式で SIA を構成できることが示された [1]。汎用性と容易な高次数化という側面が大幅に緩和されたわけで、RK 公式には既に十分な研究蓄積があるという背景もあって、爾来数値積分への応用の関心が更に広がり、SIA の研究が多面的、かつ急速に進みつつある [2, 3]。

symplectic 写像の局所表現に、余り知られていないが、Weinstein の発見によるものがある [4]。これは新種の母関数を用いる表現で、線形空間論における Cayley 変換 [5] を非線形化したものと解釈される。この表現は陰的中点公式を含むなど数値的な応用も期待できる興味深い表現である。

本報告では、まず Weinstein 母関数による symplectic 写像の表現を紹介し、SIA の可逆性の簡単な特徴付けを与える。RK 公式の範囲では、(任意の常微分方程式系に適用した際)可逆性を有するものが対称 RK 公式という名称で従来から知られていたが、これらが線形 symplectic 性を有することに注目して、RK 公式の中で

- 線形 symplectic な公式
- 対称公式
- $M = 0$ を満たす公式

の3者について、包含関係や、Hamilton 系を積分する際の許容する力学的性質について考察を行う。

2 Symplectic 写像の Weinstein 母関数表現

自由度 N の保存的 Hamilton 系を 1 つ定めておこう。

$$\frac{dx}{dt} = J \cdot \text{grad}H(x), \quad \text{ただし, } J = \begin{pmatrix} 0 & I \\ -I & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.1)$$

ここで、相空間 D は、 \mathbf{R}^{2N} またはその領域とし、上式中の Hamiltonian H も含め、以下現れる関数および写像は、特に断らない限り D 上で必要階数だけ連続可微分であると仮定する。

Weinstein 母関数による symplectic 写像の表現を導くことにする。そのために、線形空間論で周知の Cayley 変換の復習から始めよう。任意の実正則行列 K を固定し、 ${}^tPKP = K$ を満たす実行列 P 全体のなす線形 Lie 群とその Lie 環の部分集合を以下のように定義する。

$$\begin{aligned} G_{-1} &= \{P \in GL(2N, \mathbf{R}) \mid {}^tPKP = K, \det(I + P) \neq 0\}, \\ g_1 &= \{Q \in M(2N, \mathbf{R}) \mid {}^tQK + KQ = 0, \det(I - Q) \neq 0\}. \end{aligned}$$

定理 1 次式で定義される写像 $\sigma: g_1 \rightarrow G_{-1}$ 及び $\tau: G_{-1} \rightarrow g_1$ はそれぞれ全単射であり、一方は他方の逆写像である。

$$\sigma(Q) = (I + Q)(I - Q)^{-1}, \quad \tau(P) = -(I - P)(I + P)^{-1}. \quad (2.2)$$

証明は省略する。 $K = I$ の下で $\sigma(-Q)$ を Cayley 変換と紹介されることがあるが、符号の差異は本質的でない。我々の興味は、

$$K = J$$

のとき、すなわち、Cayley 変換が symplectic 群 (の部分集合) とその Lie 環 (の部分集合) とを結ぶ場合にある。以降、 G_{-1} 及び g_1 を、 $K = J$ の下で考える。 $\sigma(Q)$ を推移行列とする差分方程式を、Padé 近似に関連させて、線形 Hamilton 系の数値積分に用いることを試みた仕事もあることや [6]、 $Q_0 \in sp(2N, \mathbf{R})$ ならば、 Q_0 の奇数次項のみからなる多項式 (級数) はやはり $sp(2N, \mathbf{R})$ の元となることにも触れておく。

さて、 D 上の symplectic 写像

$$y = \phi(x) \quad (2.3)$$

で、その Jacobi 行列 $P \equiv \partial\phi/\partial x$ が固有値 -1 を持たないものを考えよう。(2.3) に対して、

$$z = (\phi(x) + x)/2, \quad (2.4a)$$

$$w = (\phi(x) - x)/2, \quad (2.4b)$$

とおく。ここで、 $\det(I + P) \neq 0$ が成り立つから、(2.4a) は (少なくとも局所的に) 逆に解けて、 x は z の関数とみなせる。そこで(2.4b) の w を z の関数とみなし、

$$T(z) = \frac{\phi(x(z)) - x(z)}{2} \quad (2.5)$$

を定めることで、 z を中間変数とした写像表現

$$y = z + T(z), \quad x = z - T(z). \quad (2.6)$$

を得る。ここで、 $T(z)$ は(2.4a) 及び(2.5) で定義され、その Jacobi 行列 Q は固有値 1 を持たない。実際、 Q は $\tau(P)$ に等しく、かつ定理 1 から固有値 1 を持たない。ここで、写像 (2.3) の symplectic 性を陽に用いると、次のことが成立する。

定理 2 写像 (2.3) が symplectic であつその Jacobi 行列が固有値 -1 を持たないならば、少なくとも局所的にある関数 $S(z)$ が存在して、写像は

$$y = z + J \cdot \text{grad } S(z), \quad x = z - J \cdot \text{grad } S(z), \quad (2.7a)$$

と表現される。

証明 仮定から $P \in G_{-1}$ だから、定理 1 より $Q \in g_1$ 。これは、補題 2.5 における T が、 $J \cdot \text{grad } S$ とかけるための可積分条件を満たすことを意味する。

定義 1 symplectic 写像を (2.7a) の形に表現するとき、 S を Weinstein 母関数という。

定理 2 から分かるように、ほとんどすべての symplectic 写像が (2.7a) の形に表現される。これを $y = x_{n+1}$, $x = x_n$ (n はステップ数) として Hamilton 系 (2.1) の離散近似スキームとして用いるための整合性条件は、定数差を除いて、等式

$$S(z) = \frac{h}{2} H(z) + o(h) \quad (h \text{ は区間幅}) \quad (2.7b)$$

が成立することである。任意の SIA の Jacobi 行列は、 $h > 0$ が十分小さいとき恒等行列に近いから、すべての SIA は原理的に(2.7)の形に表現できることが分かる。特に、注目すべきは

$$\text{grad } S \text{ が } h \text{ の奇関数である} \quad (2.8)$$

ときであろう。写像 (2.7) に関して、区間幅を明示した形で、

$$\phi_h : x \mapsto y, \quad \psi_{h/2} : z \mapsto y$$

と記すことにすると、(2.8) \rightarrow (2.9) \rightarrow (2.10) が従うことが分かる。

$$\phi_h = \psi_{h/2} \circ \psi_{-h/2}^{-1}, \quad (2.9)$$

$$\phi_{-h} = \phi_h^{-1}. \quad (2.10)$$

また、(2.10) \rightarrow (2.8) も容易に証明されることから次の定理を得る。

定理 3 SIA ϕ_h に関して次の 3 命題は同値である。

1. $\phi_{-h} = \phi_h^{-1}$ 。
2. Weinstein 母関数 S について、 $\text{grad } S$ が h の奇関数。
3. ϕ_h はあるスキームの前進型と後退型との合成公式になる。

定義 2 ϕ_h が性質 (2.10) を満たすときスキームは可逆であるという。

可逆性は力学系のフローの 1 性質を継承したものと見なせる。可逆な SIA の分解 (2.9) における ψ_h は、一意的に決まる訳でもなく、一般に symplectic でもない。また、 ψ_h が低次公式でありながら、 ϕ_h が高次になることもある。本節の最後に、 $S = h \cdot H/2$ とするとき、上の定理が満たされ、

1. ψ_h は (前進型) Euler 公式、
2. ϕ_h は陰的中点公式 (1 段 Gauss-Legendre 公式)、

になることを注意する。既に知られているように、Gauss-Legendre 公式は symplectic 写像を実現する RK 公式の代表例であった。

3 RK 公式の復習

本節では、RK 公式の簡単な説明を与える。

段数と呼ばれる自然数 s に対して、 $s^2 + 2s$ 個の実パラメータ

$$\begin{array}{c|cccc}
 c_1 & a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1s} \\
 c_2 & a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2s} \\
 \cdot & & \cdots & \cdots & \\
 c_s & a_{s1} & a_{s2} & \cdots & a_{ss} \\
 \hline
 & b_1 & b_2 & \cdots & b_s
 \end{array} \tag{3.1}$$

によって、任意の常微分方程式 (系)

$$\frac{dx}{dt} = f(t, x)$$

(の初期値問題) を、以下の手順で離散化する手続きを、 s 段 RK 公式という。

$$\begin{cases}
 x_{n+1} = x_n + h(b_1 k_1 + b_2 k_2 + \cdots + b_s k_s) \\
 k_1 = f(t_n + c_1 h, x_n + h(a_{11} k_1 + a_{12} k_2 + \cdots + a_{1s} k_s)) \\
 k_2 = f(t_n + c_2 h, x_n + h(a_{21} k_1 + a_{22} k_2 + \cdots + a_{2s} k_s)) \\
 \cdots \\
 k_s = f(t_n + c_s h, x_n + h(a_{s1} k_1 + a_{s2} k_2 + \cdots + a_{ss} k_s))
 \end{cases} \tag{3.2}$$

ここで、 $A = (a_{ij})$ 、 $b = {}^t(b_1, b_2, \dots, b_s)$ を、それぞれ、RK 行列、重みベクトルといい、(3.1) を Butcher 表と呼ぶ。重み成分は整合性条件 (B(1) 条件)

$$b_1 + b_2 + \cdots + b_s = 1 \tag{3.3}$$

を満たさねばならない。つまり、(3.3) に従うパラメータ (3.1) が 1 つの RK 公式を定める。多くの RK 公式は、B(1) 条件以外に C(1) 条件

$$c_i = \sum_{j=1}^s a_{ij}, \quad i = 1, \dots, s$$

を満たすので、RK 公式を Stetter 表 A_b の形で表すことも多い。

RK 公式は、RK 行列 A の形によって 3 種類に分類される。 A がそれぞれ

1. 対角成分がすべて 0 の下三角行列
2. 非零の対角成分を持つ下三角行列
3. 非三角行列

のとき、陰的、半陰 (陽) 的、陽的公式という。標準 RK 公式も含めてよく使われる陽的公式では、(3.2) における k_i が逐次昇順に計算できるが、(半) 陰的公

式では1ステップ毎に反復を用いて k_i を計算せねばならない。

RK 公式のパラメータによって定まる有理関数 (陽的公式では多項式)

$$R(z) = \frac{|I - zA + ze {}^t b|}{|I - zA|}, \quad {}^t e = (1, 1, \dots, 1) \quad (3.4)$$

を、RK 公式の安定性関数という。(3.2) の手順で、定係数線形系 $dx/dt = Ux$ を離散化した際、線形漸化式 $x_{n+1} = R(hU)x_n$ が従うが、推移行列に $R(z)$ が現れる。硬い系 [7] の積分の際、陽的 RK 公式を使用するのは実用上無理があり、例えば、(かなり強い対処法であり、もっと弱い対処法もあるが) A 安定な公式、すなわち、

$$\operatorname{Re}(z) < 0 \text{ のとき、 } |R(z)| \leq 1 \text{ を満たす} \quad (3.5)$$

公式などを使用すべきことはよく知られている。§5 で触れるが、symplectic 性はこのような A 安定性を (ある意味で) 自然にもたらすのである。

最後に、

$$m_{ij} = b_i a_{ij} + b_j a_{ji} - b_i b_j \quad (3.6)$$

を成分とする対称行列 M にも触れる。Sanz-Serna は、 $M = 0$ を満たす RK 法が、任意の Hamilton 系の数値積分において、symplectic 写像を実現することを示した [1]。実は、

$$M \geq 0 \text{ (非負定値)}, \quad b \geq 0 \quad (3.7)$$

を満足する RK 公式は代数安定であるといつて、A 安定性、B 安定性など強力な性質が自然に従うことが知られている [8]。

4 対称 RK 公式

可逆性をもつ RK 公式として知られている対称 RK 公式を見ることにしよう。

周知のように、RK 公式の全体は写像の合成を積として群をつくる [9]。いま、Stetter 表 $\frac{A}{b^T}$ で定まる既約な RK 公式を、1 階常微分方程式に適用して得られる写像を ψ_h とかけば、写像 $\psi_{h/2} \circ \psi_{-h/2}^{-1}$ は 1 つの RK 公式 $\frac{(-A+eb^T)/2 \quad 0}{\frac{eb^T/2}{b^T/2} \quad \frac{A/2}{b^T/2}}$ で実現される。ただし、得られた Stetter 表は可約になることもある。逆に、任意の常微分方程式に適用した際に可逆性を持つ RK 公式を対称という [9]。対称 RK 公式は、RK 公式の範囲内で (2.9) のような分解ができることが知られていた。次の定理は、[9, § 3.2] の定理達を少し変えて得られるものである。

定理 4 既約な RK 公式 $\frac{A}{b^T}$ が対称であるための必要十分条件は、ある置換行列 P によって、

$$A + PAP^{-1} = eb^T, \quad Pb = b, \quad (4.1)$$

すなわち、成分でかくと置換を σ として $a_{ij} + a_{\sigma(i)\sigma(j)} = b_j = b_{\sigma(j)}$ が成立することである。そして、このとき分解 (2.9) の ψ_h は RK 公式 $\frac{eb^T - 2A}{b^T}$ で実現される。

2 段対称 RK 公式を例示しよう。

例 1 (2 段対称 RK 公式) $P = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ とし、整合性条件 $\sum b_j = 1$ ($B(1)$ 条件)のもとで (4.1) をみたす RK 公式をすべて求めると、

$$\frac{\begin{matrix} 1/4 + \alpha & 1/4 - \beta \\ 1/4 + \beta & 1/4 - \alpha \end{matrix}}{\begin{matrix} 1/2 & 1/2 \end{matrix}} \quad (4.2)$$

(α, β は任意パラメータ) となり、2 次以上の公式を得る。定理 4 にいう ψ_h は、 $\frac{-2\alpha \ 2\beta}{1/2 \ 1/2}$ で実現されるが、これらはすべて 1 次である。安定性の観点から (4.2) をみると、

$|\alpha| \leq |\beta|$ のとき A 安定 [8, § 2.2], $\alpha = 0$ のとき代数安定 [8, § 4.2]。

また、(4.2) を既知の公式と関連させると、

1. $\alpha = 0, \quad \beta = \sqrt{3}/6$ Gauss-Legendre
2. $\alpha = -1/4, \quad \beta = 1/4$ Lobatto IIIA
3. $\alpha = 1/4, \quad \beta = 1/4$ Lobatto IIIB
4. $\alpha + \beta = 1/2$ 対称 Lobatto [10]

などが挙げられるが、このうち 1 のみが 4 次公式である (定理 4 で $P = I$ としたときは、陰的中点公式のみが得られる)。

さて、対称 RK 公式の幾つかの性質を挙げて次節につなげよう。まず、安定性関数に関して次の定理が成り立つ。

定理 5 対称 RK 公式の安定性関数 $R(z)$ は、 z の如何に拘わらず次式を満たす。

$$R(z)R(-z) = 1 \quad (4.3)$$

証明 条件 (4.1) から、 $-A + {}^t eb = PAP^{-1}$ 。よって、(3.4) から、安定性関数は $|I + zPAP^{-1}|/|I - zA| = |I + zA|/|I - zA|$ となり、式 (4.3) が従う。

対称 RK 公式と symplectic 性とを結びつける 1 つの定理を挙げる。

定理 6 代数安定、かつ対称な RK 公式は、 $M = 0$ を満たす。

証明 条件 (4.1) と M の定義式 (3.6) から、直ちに $PMP^{-1} = -P$ が従うので、 M の固有値は λ と $-\lambda$ のペアの形で存在する。(3.7) を考慮すると、 $M \geq 0$ となるためには、 $M = 0$ でなければならない。

段数が 2 のときは、B(1) 条件の下で対称 RK 公式の重み成分は $b_1 = b_2 = 1/2$ となるが、段数が 3 以上になると、対称性という条件だけでは $b \geq 0$ は必ずしも保証されない。

5 RK 公式と symplectic 性

本節では、SIA に特有の性質を、symplectic 性を具現する RK 公式を通じて探りたいという目的を背景に、以下の 3 種類の RK 公式達達のなす包含関係や付随する力学的性質を考察する。

1. $R(z)R(-z) = 1$ を満たす RK 公式。
2. 対称 RK 公式。
3. $M = 0$ を満たす RK 公式。

式 (4.3) は、任意の線形 Hamilton 系に公式を適用する際、線形 symplectic 写像を得るための必要十分条件である [11]。そういう意味で、(4.3) を満たす RK 公式を、線形 symplectic と呼ぶことがある。定理 5 からすべての対称公式が該当する。線形 symplectic 公式の中でも有用なのは、

$$R(z) \text{ が左半平面に極を持たない} \quad (5.1)$$

のものであろう。実際、(4.3) と (5.1) の下で、安定性関数は以下の性質を持ち、

$$\operatorname{Re}(z) < 0 \text{ のとき、 } |R(z)| < 1, \quad (5.2a)$$

$$\operatorname{Re}(z) = 0 \text{ のとき、 } |R(z)| = 1, \quad (5.2b)$$

$$\operatorname{Re}(z) > 0 \text{ のとき、 } |R(z)| > 1, \quad (5.2c)$$

従って、まず次の事柄がわかる。

1. 線形 symplectic 公式が、A 安定であるための必要十分条件は (5.1) が成り立つことである。

更に、A 安定な線形 symplectic 公式を、(必ずしも Hamilton 系ではない) 定係数線形系に適用するとき、区間幅 $h > 0$ をどのようにとっても、計算誤差を無視する限り、数値解は

2. 原点へ収束する軌道は収束するように、無限遠に発散する軌道は発散するように、
3. 2変数 (Hamilton 系では自由度が 1) の場合、楕円軌道は完全な形で、

再現されることも分かっている [12]。対象が定係数線形系という限られたものであるが、軌道再現性に優れていることが窺える。

さて、冒頭の 3 種類の RK 公式達に戻ろう。集合としてのこれら 3 種の包含関係を、図 1 に示す。

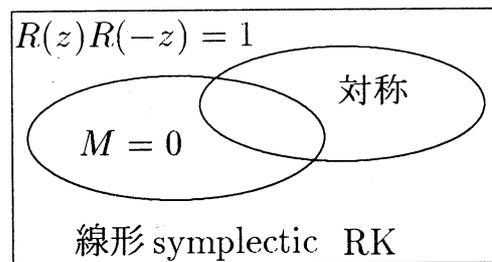


図 1: symplectic 性に関連する公式達の包含関係

2つの部分集合はいずれも真部分集合であり、両者間に包含関係はない。

図 1 に現れる公式達の持つ力学的性質を対照すると、面白い事実が分かる。

1. $R(z)R(-z) = 1$ を満たす RK 公式
 - (a) 線形 Hamilton 系に適用するとき、線形 symplectic 写像を与える。
 - (b) 任意の定係数線形系に対して可逆である。
 - (c) 任意の定係数線形系の高々 2 次多項式の第 1 積分を継承・保存する [13]。
2. 対称 RK 公式
 - (a) 任意の常微分方程式に対して可逆である。
3. $M = 0$ を満たす RK 公式
 - (a) SIA である。
 - (b) 任意の常微分方程式の高々 2 次多項式の第 1 積分を継承・保存する [14]。

注：一般に RK 公式は高々 2 次の多項式以外の第 1 積分を継承・保存しないというのは、蓋然性の高い予想である。例えば、いかなる RK 法も、斉 $r (\geq 3)$ 次の第 1 積分を継承・保存しないことが証明されている [15]。

上記から、適用対象を線形系に限定したとき線形 symplectic 公式の持つ力学的性質が、対象を非線形な力学系に拡大した際 2 種類の RK 公式に分かれて伝搬していることが見て取れる。2 種類の RK 公式の共通部分、すなわち、 $M = 0$ を満たす対称 RK 公式が、両者の性質を具備する。§4 の例でいうと、Gauss-Legendre 公式を含む 1 パラメータ公式族 $\frac{1/4 \quad 1/4-\beta}{1/2 \quad 1/2}$ が該当する。こういう意味で、定理 6 にいう「代数安定な対称 RK 公式」が、離散化に際して重要な力学的な側面を継承することがわかるし、またこれらの公式は、どの段数においても、Gauss-Legendre 公式を含む family を構成し、その中にはパラメータの扱いやすいものが存在する。

定係数線形系を対象とする限り、A 安定性と代数安定性の間にはそれほど差はない。しかし、非線形系に対しては、例えば B 安定性 [8, § 4.1] の論法を敷衍することで、

$$M = 0, \quad \text{かつ} \quad b > 0 \quad (5.3)$$

を満たす公式は、非常に標語的な言い方をすれば、概ね

1. 互いに近接していく軌道達は、近接していくように、
2. 互いに離れていく軌道達は、離れていくように、

再現することも分かる。

RK 公式に本質的に由来する 2 つの性質を示したが、これらは SIA が良好な構造再現性を有することの、RK 公式を通じて見た部分的な証明でもある。しかし、軌道相全般の良好な数値的再現性という大域的な性質を説明できる論理は残念ながらまだ未完のようである。

最近、RK 公式で実現される SIA に関する研究が増大しているばかりでなく、微分幾何学的なトピックに対する数値解析からのアプローチが増えつつある。最後に、今後への貴重な方向性が示唆されているように感じる意味で文献 [16] を挙げて、本報告を終わる。

参考文献

- [1] Sanz-Serna, J.M., Runge-Kutta schemes for Hamiltonian systems, BIT, 28 (1988), 877-883.
- [2] Sanz-Serna, J.M. and Calvo, M.P., Numerical Hamiltonian problems, Chapman & Hall, London, 1994.
- [3] Yoshida, H., Recent progress in the theory and application of symplectic integrators, Celest. Mech. Dynam. Astron, 56 (1993), 27-43.
- [4] Weinstein, A., Symplectic manifolds and their Lagrangian submanifolds, Adv. in Math., 6 (1971), 329-346.
- [5] 佐竹一郎、線型代数学、裳華房、東京、1974。
- [6] Feng, K. and Qin, M., The symplectic methods for the computation of Hamiltonian equations, Lec. Notes Math., 1297 (1987), 1-37.
- [7] 三井斌友、数值解析入門、朝倉書店、東京、1985。
- [8] Dekker, K. and Verwer, J.G., Stability of Runge-Kutta methods for stiff nonlinear differential equations, Elsevier, Amsterdam, 1984.
- [9] Stetter, H.J., Analysis of discretization methods for ordinary differential equations, Springer, Berlin, 1973.
- [10] 一松信、対称型 Runge-Kutta 公式, 応用数学合同研究集会報告集、瀬田、1997, 237-238。
- [11] Feng, K., On difference schemes and symplectic geometry, Proceedings of the 5-th International Symposium on Differential Geometry and Differential Equations, Aug., 1984, Beijin.
- [12] 前田茂、数值解の異常収束と異常収束を発生させないルンゲ・クッタ型公式, 信学論 A、J74-A (1991), 1541-1546 (Engl. Trans., Electro. Commun. in Japan, Part 3, 75 (1992), 84-91。
- [13] Maeda, S., On inheritance of quadratic first integral of linear system via Runge-Kutta methods, J. Math. Tokushima Univ., 31 (1997), 63-67.
- [14] Cooper, G.J., Stability of Runge-Kutta methods for trajectory problems, IMA J. Numer. Anal., 7 (1987), 1-13.

- [15] Calvo, M., Iserles, A. and Zanna, A., Runge-Kutta methods on manifolds, Preprint, NA1995-09-PS.Ps.
- [16] SciCADE97, Scientific Computing and Differential Equations, Grado(Italy), 15-19 Sept. 1997.
- [17] 前田茂、シンプレクテック写像の応用について—ハミルトン系の離散版—、応用数理、8 (1998), 30-39。