

ハミルトン系の保存則に対する勾配系の方法 A Gradient Method for Conservation Laws in Hamiltonian Systems

東大理 梅木 誠 (Makoto Umeki)

Department of Physics, Graduate School of Science
University of Tokyo

1 はじめに

ハミルトン方程式系の数値計算において、その時間発展の過程で保存量が精度良く保たれているかどうかは、シミュレーションの妥当性を判断する根拠の一つと考えられている。本論文では、ハミルトン系に勾配型の項を加えることにより、その保存量が平均として、指数的にある定数パラメータに近づくような方程式系を構成できることを示す。ここで、その系をハミルトン・勾配系と呼ぶ事にする。

まず、保存量がハミルトニアンのみの場合を示し、次に、保存量がハミルトニアン以外にある場合を考える。数値計算できる簡単な例として、単振動と円筒内の点渦系を考える。円筒内の点渦系は、ハミルトニアンと角インパルスの2つを保存量として持つので、本論文で考える例として適当である。最後に、この研究の動機と他の積分法との比較についての考察を述べる。

2 一つの保存量に対するハミルトン・勾配系

以下のような N 自由度のハミルトン・勾配系を考える。

$$\frac{dx_j}{dt} = \frac{\partial H}{\partial y_j} - \frac{\partial G}{\partial x_j}, \quad \frac{dy_j}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x_j} - \frac{\partial G}{\partial y_j}. \quad (1)$$

ここで、 $j = 1, \dots, N$ であり、 $H = H(x, y)$ と $G = G(x, y)$ は、それぞれハミルトニアンとポテンシャルである。

まず、保存量がハミルトニアンのみの場合を考える。この場合は $G = \alpha(H - H_0)^2/2$ と取ればよい。ここで、 $\alpha > 0$ は定数であり、ハミルトン系での保存量がハミルトン・勾配系で定数に近づく速さを決めるパラメータである。この場合のハミルトン・勾配系は以下のように書ける。

$$\frac{dx_j}{dt} = \frac{\partial H}{\partial y_j} - \alpha(H - H_0) \frac{\partial H}{\partial x_j}, \quad \frac{dy_j}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x_j} - \alpha(H - H_0) \frac{\partial H}{\partial y_j}. \quad (2)$$

ハミルトン系での保存量の時間発展は、次のようになる。

$$\frac{dH}{dt} = \frac{d(H - H_0)}{dt} = \frac{\partial H}{\partial x_j} \frac{dx_j}{dt} + \frac{\partial H}{\partial y_j} \frac{dy_j}{dt} = -\alpha(H - H_0) \left[\left(\frac{\partial H}{\partial x_j} \right)^2 + \left(\frac{\partial H}{\partial y_j} \right)^2 \right]. \quad (3)$$

ここで、繰り返しの添え字は $j = 1$ から N までの和を表す。これは

$$\frac{d}{dt} \log |H - H_0| = -\alpha \left[\left(\frac{\partial H}{\partial x_j} \right)^2 + \left(\frac{\partial H}{\partial y_j} \right)^2 \right] \quad (4)$$

と書きなおせるので、 $|H - H_0|$ は時間の減少関数である。上式右辺の大かっこが正の時間平均を持てば、

$$H \approx H_0[1 + d \exp(-kt)] \quad (5)$$

と書け ($d, k > 0$ は定数)、ハミルトニアンは定数に指数的に近づく事がわかる。

3 二つの保存量に対するハミルトン・勾配系

次に、ハミルトニアン以外に保存量 I が存在する場合を考える。以下のように I と H のポアンソンのブラケットは 0 となる。

$$\frac{dI}{dt} = \frac{\partial I}{\partial x_j} \frac{\partial H}{\partial y_j} - \frac{\partial I}{\partial y_j} \frac{\partial H}{\partial x_j} = \{I, H\}_{PB} = 0. \quad (6)$$

この場合のポテンシャルは、 α, β を正の定数として、以下のように取ればよい。

$$G = G_1 + G_2, \quad G_1 = \frac{\alpha}{2}(H - H_0)^2, \quad G_2 = \frac{\beta}{2}(I - I_0)^2. \quad (7)$$

このハミルトン・勾配系に対し、 H の時間発展は以下のように書ける。

$$\frac{dH}{dt} = \frac{d(H - H_0)}{dt} = -\alpha(H - H_0)A - \beta(I - I_0)B, \quad (8)$$

ここで、 A, B はそれぞれ、

$$A = \left(\frac{\partial H}{\partial x_j}\right)^2 + \left(\frac{\partial H}{\partial y_j}\right)^2 \quad (9)$$

と

$$B = \frac{\partial H}{\partial x_j} \frac{\partial I}{\partial x_j} + \frac{\partial H}{\partial y_j} \frac{\partial I}{\partial y_j} \quad (10)$$

である。

同様に、 I の時間発展は以下ようになる。

$$\frac{dI}{dt} = \frac{d(I - I_0)}{dt} = -\alpha(H - H_0)B - \beta(I - I_0)D. \quad (11)$$

ここで、 B は式 (10) と同じであり、 D は

$$D = \left(\frac{\partial I}{\partial x_j}\right)^2 + \left(\frac{\partial I}{\partial y_j}\right)^2 \quad (12)$$

で与えられる。

ポテンシャル G の時間発展をみると、以下のような二次形式で表される事がわかる。

$$\frac{dG}{dt} = -(H - H_0 \quad I - I_0) \begin{pmatrix} A\alpha^2 & B\alpha\beta \\ B\alpha\beta & D\beta^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} H - H_0 \\ I - I_0 \end{pmatrix}. \quad (13)$$

上式を 2 次形式を平方完成する事により、(特殊な場合、すなわち定常解を除いて) dG/dt は正である事がわかる。実際、

$$(x_1, y_1, \dots, x_N, y_N) = (X_1, X_2, \dots, X_{2N-1}, X_{2N}), \quad (14)$$

$$\frac{\partial H}{\partial X_j} = Y_j, \quad \frac{\partial I}{\partial X_j} = Z_j, \quad (15)$$

と書きなおすと、

$$A = \sum_j Y_j^2, \quad D = \sum_j Z_j^2, \quad B = \sum_j Y_j Z_j. \quad (16)$$

となる。式(13)の右辺の行列式は

$$\alpha^2 \beta^2 (AD - B^2) = \alpha^2 \beta^2 \sum_{j>k} (Y_j Z_k - Y_k Z_j)^2, \quad (17)$$

であるので、0または正である。 dG/dt が0となるのは、 $H - H_0 = I - I_0 = 0$ の場合、または $A = 0$ かつ $Y_j Z_k - Y_k Z_j = 0$ が全ての $j > k$ について成り立つ場合のみである。すなわち、 $Y_j = Z_j = 0$ が全ての j について成り立つ場合(定常解)のみである。

4 例1：一自由度の単振動

まず、ハミルトン系に対し、従来より数値計算でよく用いられる陽的な数値積分法として、一次精度のオイラーの方法、二次精度であるホインの方法と中点法、四次のルンゲクッタ法を用いて、それぞれ保存則がどのように破られているかを整理しておく。ここで、ホインの方法とは台形則とか、文献によって、修正オイラー法と呼ばれているものである。中点法は改良オイラー法とも呼ばれている。しかし、別の文献では修正オイラー法が中点法の意味で用いられている場合もあり、混乱を避けるためには、それぞれを、ホインの方法及び中点法と呼ぶのがよいであろう。また、通常、ルンゲクッタ法といえば、四次のルンゲクッタ法の事を意味する事が多い。

ここでは、詳細を示さずに結果だけ述べる事にする。一自由度の単振動の系を以下のように表す。

$$\frac{dx}{dt} = f(x, y) = \omega y, \quad \frac{dy}{dt} = g(x, y) = -\omega x. \quad (18)$$

保存量は、ハミルトニアン $H = \omega^2(x^2 + y^2)/2$ であり、以下では H と定数倍違うだけである、 $R(t) = x^2(t) + y^2(t)$ のワンステップ後の変化を調べる。

4.1 オイラー法

オイラー法は Δt 後に、 $R(t)$ に対して $O(\Delta t^2)$ の誤差を与える。

$$R(t + \Delta t) = (1 + \omega^2 \Delta t^2) R(t). \quad (19)$$

4.2 ホインの方法及び中点法

ホインの方法と中点法は、 $R(t)$ についてはともに同じ誤差、 $O(\Delta t^4)$ を与える。

$$R(t + \Delta t) = \left(1 + \frac{1}{4} \omega^4 \Delta t^4\right) R(t). \quad (20)$$

4.3 四次のルンゲクッタ法

四次のルンゲクッタ法は、 $R(t)$ について $O(\Delta t^6)$ の誤差を与える。

$$R(t + \Delta t) = \left(1 - \frac{1}{72}\omega^6\Delta t^6 + \frac{1}{576}\omega^8\Delta t^8\right) R(t). \quad (21)$$

このように、いずれの方法もハミルトニアン¹の代数的増加（又は減少）を与える。

次に、ハミルトン・勾配系を考え、保存量に対してどのように収束を与えるかをみる。一自由度単振動に対するハミルトン・勾配系は以下のように書ける。

$$\begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= f(x, y) = \omega y - 2\alpha(x^2 + y^2 - c)x, \\ \frac{dy}{dt} &= g(x, y) = -\omega x - 2\alpha(x^2 + y^2 - c)y. \end{aligned} \quad (22)$$

ここで、 $c = x_0^2 + y_0^2$ は定数パラメータである。

4.4 ハミルトン・勾配系に対するオイラー法

Δt 後の $R(t)$ は以下のように書ける。

$$R(t + \Delta t) = R(t)\{1 - 4\alpha\Delta t(R(t) - c) + \Delta t^2[\omega^2 + 4\alpha^2(R(t) - c)^2]\}. \quad (23)$$

(23) を 1 次元写像とみれば、その固定点 $R(t + \Delta t) = R(t)$ は

$$R(t) = R_{f\pm} = c + \frac{1}{2\alpha\Delta t}(1 \pm \sqrt{1 - \omega^2\Delta t^2}), \quad (24)$$

で与えられる。 $\Delta t \ll 1$ ならば、

$$R_{f+} \approx c + \frac{1}{\alpha\Delta t}, \quad R_{f-} \approx c + \frac{\omega^2\Delta t}{4\alpha}, \quad (25)$$

が成り立つ。 $0 < R_{f-} < R_{f+}$ なので $R(t + \Delta t)$ の $R(t) = R_{f-}$ における傾きは 1 より小さく、 $R(t) = R_{f-}$ の固定点は線形安定である事がわかる。

4.5 ハミルトン・勾配系に対するホインの方法

Δt 後の $R(t)$ は以下のように書ける。

$$\begin{aligned} R(t + \Delta t) &= R\{1 - 4\alpha\Delta t h + 8\alpha^2 h\Delta t^2(R + h) - 2\alpha\Delta t^3[\omega^2(R + h) + 4\alpha^2 h^2(5R + h)] \\ &\quad + \Delta t^4\left[\frac{\omega^4}{4} + 2\alpha^2\omega^2(6R + h) + 4\alpha^4 h^2(h^2 + 20hR + 4R^2)\right] \\ &\quad - \alpha\Delta t^5[\omega^4 + 8\alpha^2\omega^2 h(R + 3h) + 16\alpha^4 h^3(6R + 5h)] \\ &\quad + \Delta t^6\alpha^2 R(\omega^2 + 4\alpha^2 h^2)[(R + 2h)\omega^2 + 4\alpha^2 h^2(13R + 2h)] \\ &\quad - 12\alpha^3\Delta t^7 h R^2(\omega^2 + 4\alpha^2 h^2)^2 + \alpha^2\Delta t^8 R^2(\omega^2 + 4\alpha^2 h^2)^3\}. \end{aligned} \quad (26)$$

ここで、 $R = R(t)$, $h = R(t) - c$ である。

固定点方程式 $R(t + \Delta t) = R(t)$ は $R(t)$ に関して 9 次方程式を与える。もし $\Delta t \ll 1$ であれば、その方程式は簡単になり固定点の近似解

$$R \approx R_f = c \left(1 - \frac{\omega^2 \Delta t^2}{2} \right) \quad (27)$$

を与える。9 次方程式は $R(t) = 0$ において傾きが 1 より大きく、次の零点が $R = R_f$ であるので、そこ $R = R_f$ での傾きは 1 より小さく、やはり $\Delta t \ll 1$ であれば線形安定である事がわかる。

4 次のルンゲクッタ法は上式よりも複雑な結果を与えるので、ここでは省略する。図 1 に Mathematica で計算された、一自由度の単振動に対するハミルトン・勾配系の様子を示す。

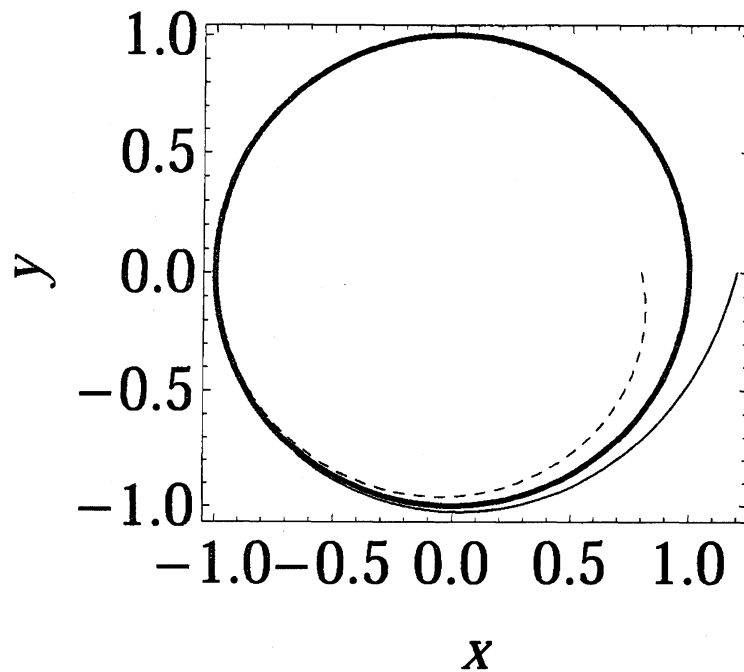


図 1: 調和振動子のハミルトン・勾配系 (22) の数値計算により得られる軌道。パラメータは $a = 0.3, c = 1$ である。初期条件は、それぞれ $(x, y) = (0.8, 0)$ (ダッシュ)、 $(1, 0)$ (太線)、及び $(1.2, 0)$ (細線) である。

5 例 2 : 円筒内の多数の点渦系

次に、半径 1 の円筒内で多数の点渦が運動する場合を考える。ハミルトニアン H は以下で与えられる。

$$H = H_1 + H_2 + H_3, \quad (28)$$

$$H_1 = -\frac{1}{2} \sum_{j>k} \log[(x_j - x_k)^2 + (y_j - y_k)^2], \quad (29)$$

$$H_2 = \frac{1}{2} \sum_{j>k} \log[(x_k x_j + y_k y_j - 1)^2 + (y_k x_j - x_k y_j)^2], \quad (30)$$

$$H_3 = \frac{1}{2} \sum_j \log(1 - x_j^2 - y_j^2). \quad (31)$$

H_1 は円内の 2 つの渦の間の相互作用による運動エネルギー、 H_2 は自分と自分以外の像との相互作用による運動エネルギー、 H_3 は自分と自分自身の像との相互作用による運動エネルギーを表す。もうひとつの保存量は角インパルスである。

$$I = \frac{1}{2} \sum_j (x_j^2 + y_j^2). \quad (32)$$

これらを用いて、ハミルトン・勾配系は以下のように書ける。

$$\begin{aligned} \frac{dx_j}{dt} &= \frac{\partial H}{\partial y_j} - \alpha(H - H_0) \frac{\partial H}{\partial x_j} - \beta(I - I_0) \frac{\partial I}{\partial x_j}, \\ \frac{dy_j}{dt} &= -\frac{\partial H}{\partial x_j} - \alpha(H - H_0) \frac{\partial H}{\partial y_j} - \beta(I - I_0) \frac{\partial I}{\partial y_j}. \end{aligned} \quad (33)$$

図 2 に、100 個の同一点渦のハミルトン・勾配系をオイラー法で計算した場合のポテンシャルの変化を示す。初期に、指数的に保存量に近づいている様子がわかる。 α, β をいろいろ変えたり、ホイン法、4 次のルンゲクッタ法など積分方法もいろいろ変えて計算を行ったが、図 2 と比べて定性的な違いは見つからなかった。

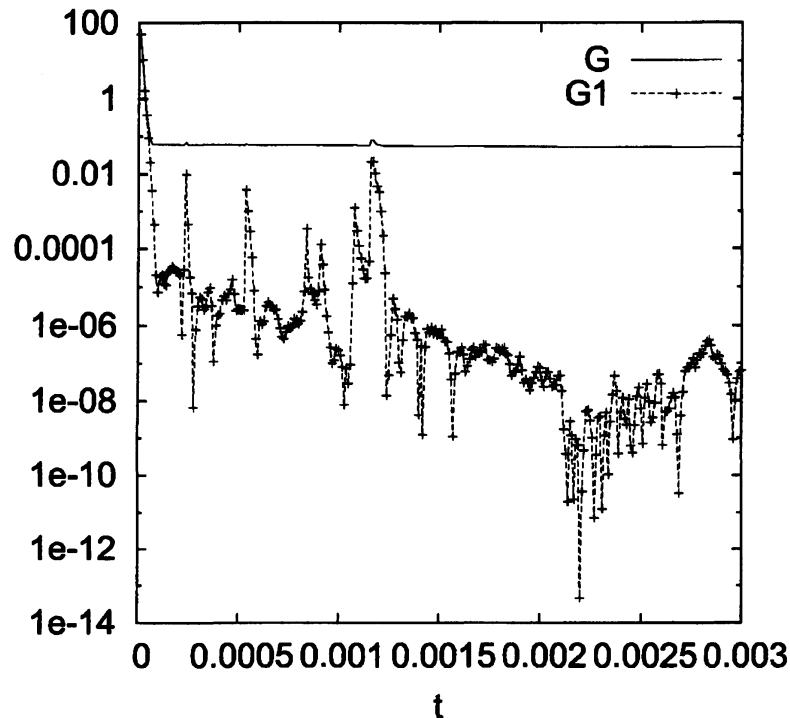


図 2: 単位円内の点渦に対するハミルトン・勾配系をオイラー法で数値積分した場合の G と G_1 の時間発展。渦の個数は $N = 100$ であり、初期分布は一様にランダムである。パラメータは $\alpha = 0.01, b = 1, \Delta t = 10^{-7}$ である。

6 考察

著者は、従来より多数の点渦の運動の数値計算を種々の場合に行ってきた。研究発表時に、数値計算の精度や妥当性に関連して、保存量が保存される度合いがどの程度かという質問をよく受ける。その質問に答えるべく、本論文において、ハミルトン・勾配系という方法を用いて保存量が数値計算のなかで保存されるようなスキームを提案した次第である。

また、ポテンシャルが位置変数 q_i のみで表される場合に、陽的な積分法が可能であるシンプレクティック積分法が提案されて、ここ20年ほどの間に、有名になっている。この方法は保存量を直接保存させるものではないが、単振動を含む多くの系で、オイラー法、ホイン法、4次ルンゲクッタ法などで現れた、ハミルトニアン of 代数的発散を抑え、保存量の長時間発展がよりよい性質を示すと考えられている。しかし、残念ながら5章でみたように、点渦系に対しては、そのハミルトニアンは変数分離系でないため、この方法は陰的スキームにとどまり、現時点では実用的とは考えにくい。