

N体シミュレーションの基礎

押野翔一 (CfCA/国立天文台)

2016/01/20

コンピュータによる実数の表現：浮動小数点

- ・コンピュータは数値を2進数で取扱う
- ・2進数 \Leftrightarrow 10進数の変換において、小数点以下は有限桁数で正確に変換できない
- ・実数はコンピュータでは浮動小数点で表現される
- ・必要な計算精度に応じて、単精度(32ビット)や倍精度(64ビット)が使われる

	符号部	指数部	仮数部
単精度	1ビット	8ビット	23ビット
倍精度	1ビット	11ビット	52ビット

$$\text{実数} = (\text{符号部}) \times 2^{(\text{指数部})} \times (1 + \text{仮数部})$$

コンピュータによる実数の表現：浮動小数点

- ・コンピュータは数値を2進数で取扱う
- ・2進数 \Leftrightarrow 10進数の変換において、小数点以下は有限桁数で正確に変換できない
- ・実数はコンピュータでは浮動小数点で表現される
- ・必要な計算精度に応じて、単精度(32ビット)や倍精度(64ビット)が使われる

	有効桁数	下限値	上限値
単精度	~7	1.175494×10^{-38}	3.402823×10^{38}
倍精度	~15	$2.225074 \times 10^{-308}$	1.797693×10^{308}

誤差

- 丸め誤差

仮数部が有限であるので途中の桁で四捨五入(2進数では0捨1入)するため生じる誤差

- 桁落ち

ほぼ等しい数どうしの減算を行ったときに有効桁数が下がること

例) $0.1234 \times 10^2 (4\text{桁}) - 0.1233 \times 10^2 (4\text{桁}) = 0.1 \times 10^{-2} (1\text{桁})$

- 情報落ち

大きな数と小さな数の加減算を行うとき、小さな数からみた誤差が大きくなっている

例) $0.1234 \times 10^2 + 0.1233 \times 10^{-1} = 0.1235 \times 10^2$

常微分方程式

物理や工学の問題の多くは微分方程式で記述される

例) 天体の軌道、電気回路

微分方程式を解析的に解く事は多くの場合不可能

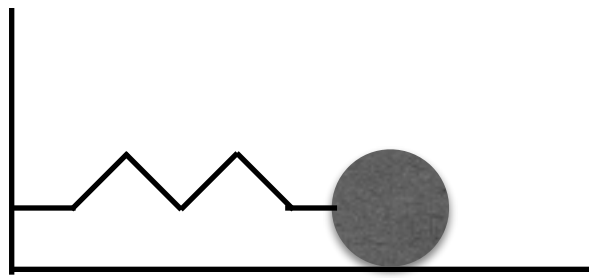


数値計算で近似値を求める

数値計算を行う際は、求めたい近似値の精度に気をつける

常微分方程式

例) 単振動



おもりに働く復元力
フックの法則

$$f = -kx$$

おもりの運動方程式

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = -kx$$

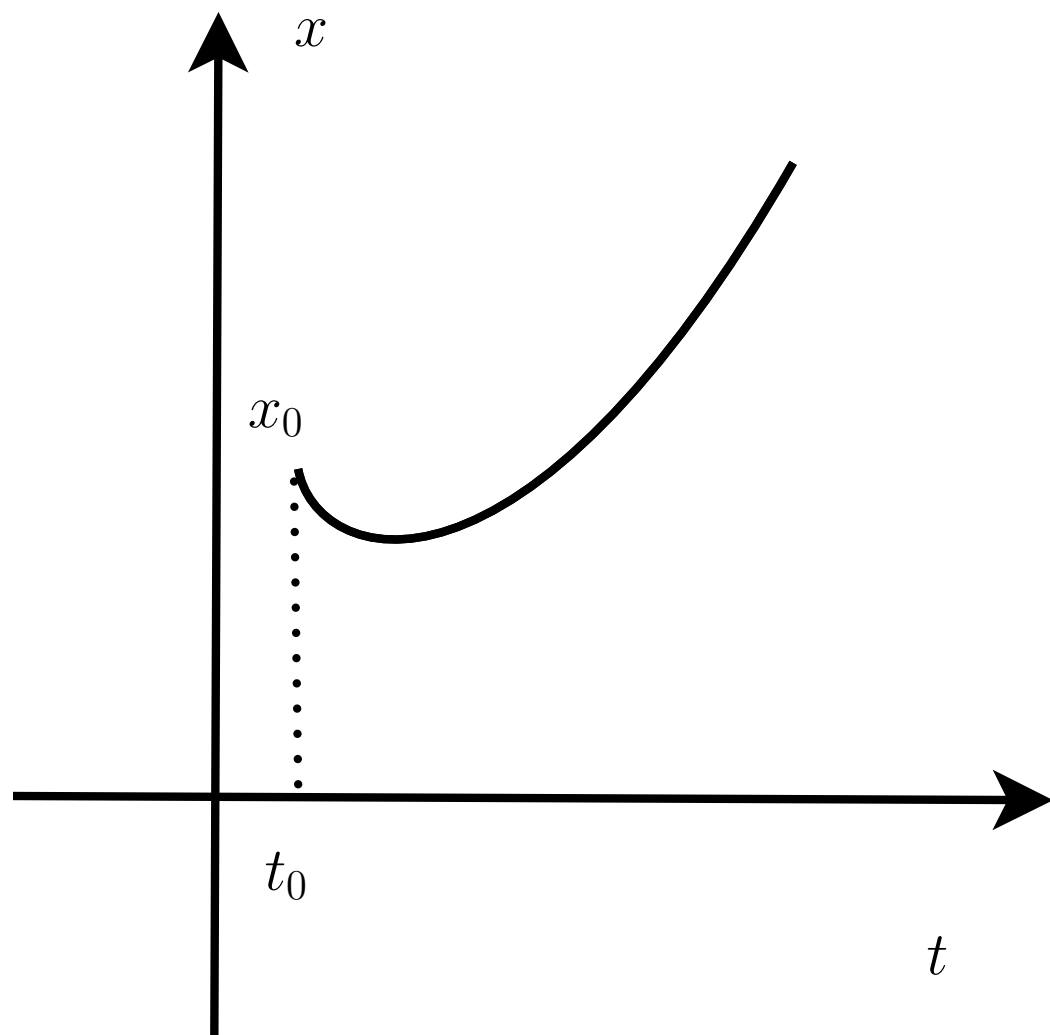
時刻 t でのおもりの位置は以下のように表せる

$$x(t) = A \cos \left(\sqrt{k/m} t \right) + B \sin \left(\sqrt{k/m} t \right)$$

常微分方程式の数値解法

一階常微分方程式： $\frac{dx}{dt} = f(x, t)$

初期値： $x(t_0) = x_0$

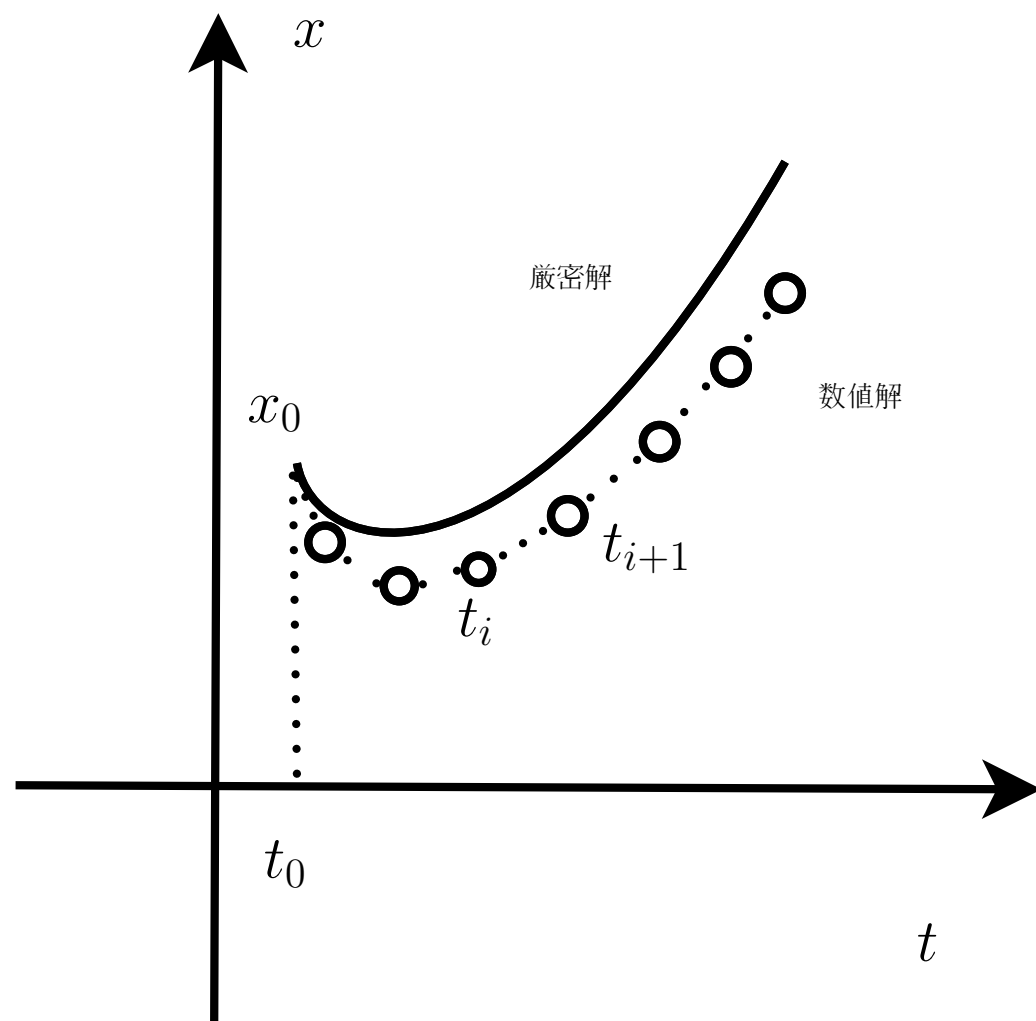


時刻 t_0 における x の値が x_0 として (初期条件)、
任意の時刻 t における x を求める。

常微分方程式の数値解法

一階常微分方程式： $\frac{dx}{dt} = f(x, t)$

初期値： $x(t_0) = x_0$

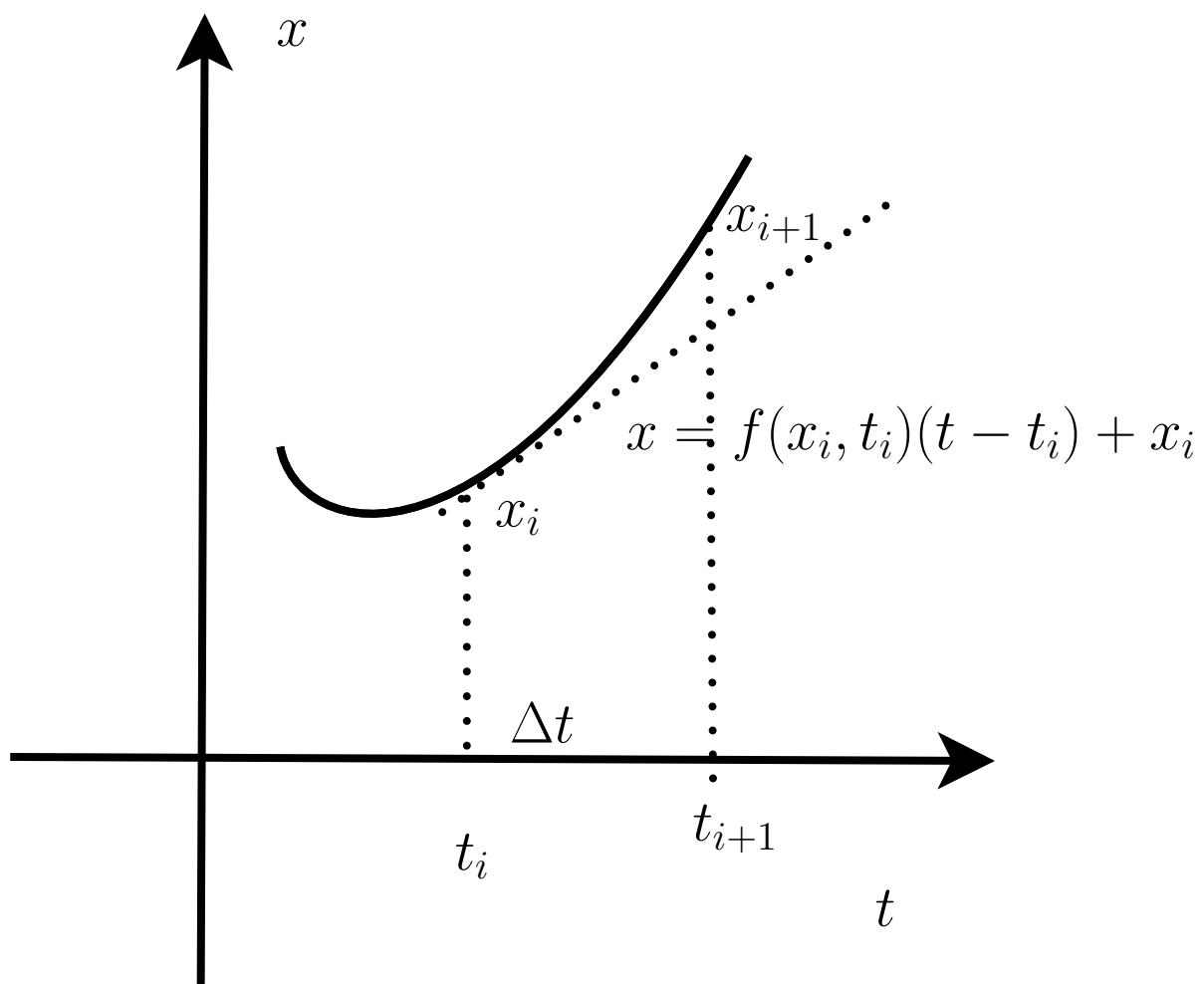


時刻 t_0 における x の値が x_0 として (初期条件)、任意の時刻 t における x を求める。

オイラー法

計算法

$$x_{n+1} = x_n + \Delta t f(x_n, t_n)$$



- 数値計算を行う際は常微分方程式の dt を有限の Δt とし、 Δt ずつ補正項 $\Delta t f(x_n, t_n)$ を計算
- Δt のことをタイムステップ、もしくは時間刻みとよぶ
- Δt が極小のとき
元の微分方程式に良く近似する

オイラー法

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

x を t_n の周りでテイラー展開する

$$x_{n+1} = x(t_n + \Delta t) = x(t_n) + \frac{dx}{dt} \Delta t + \frac{1}{2} \frac{d^2x}{dt^2} \Delta t^2 + \dots$$

この式を微分方程式を用いて書き直すと

$$x_{n+1} = \underline{x(t_n) + \Delta t f(x, t)} + O(\Delta t^2)$$

オイラー法

微分方程式

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

$$x(t_0) = x_0$$

近似



差分方程式

$$\frac{x_{n+1} - x_n}{\Delta t} = f(x_n, t_n)$$

$$t_{n+1} = t_n + \Delta t$$

$$x(t_0) = x_0$$

プログラムの構造

① 初期値の設定

変数に初期値を入力する

$$x = 1$$

$$v = 0$$

② 刻み幅の計算

今回は $dt=0.1$ を使用する

逆に数値計算を行う範囲を N 分割したい場合は
以下のように刻み幅を決定する

$$dt = \frac{1}{N}$$

プログラムの構造

③ 条件判定

現在の時間が終了時刻になっているか判定する

④ 時刻 $t + \Delta t$ での値を計算

$$x_{n+1} = x_n + f(x, t) \Delta t$$

$$t_{n+1} = t_n + \Delta t$$

新しい値を用いて次の時刻の計算を行う

プログラムの構造

```
#include <stdio.h>
#include <math.h>

int main(void)
{
    double t, x;
    const double dt = 0.1;
    const double t_end = 10.0;

    t = 0.0;
    x = 1.0;

    printf("%f, %f\n", t, x);

    while (t < t_end) {
        t += dt;
        x += x*dt;
        printf("%f, %f\n", t, x);
    }
    return 0;
}
```

オイラー法のプログラム例

ループの中の計算を
関数化しても良い

オイラー法の誤差

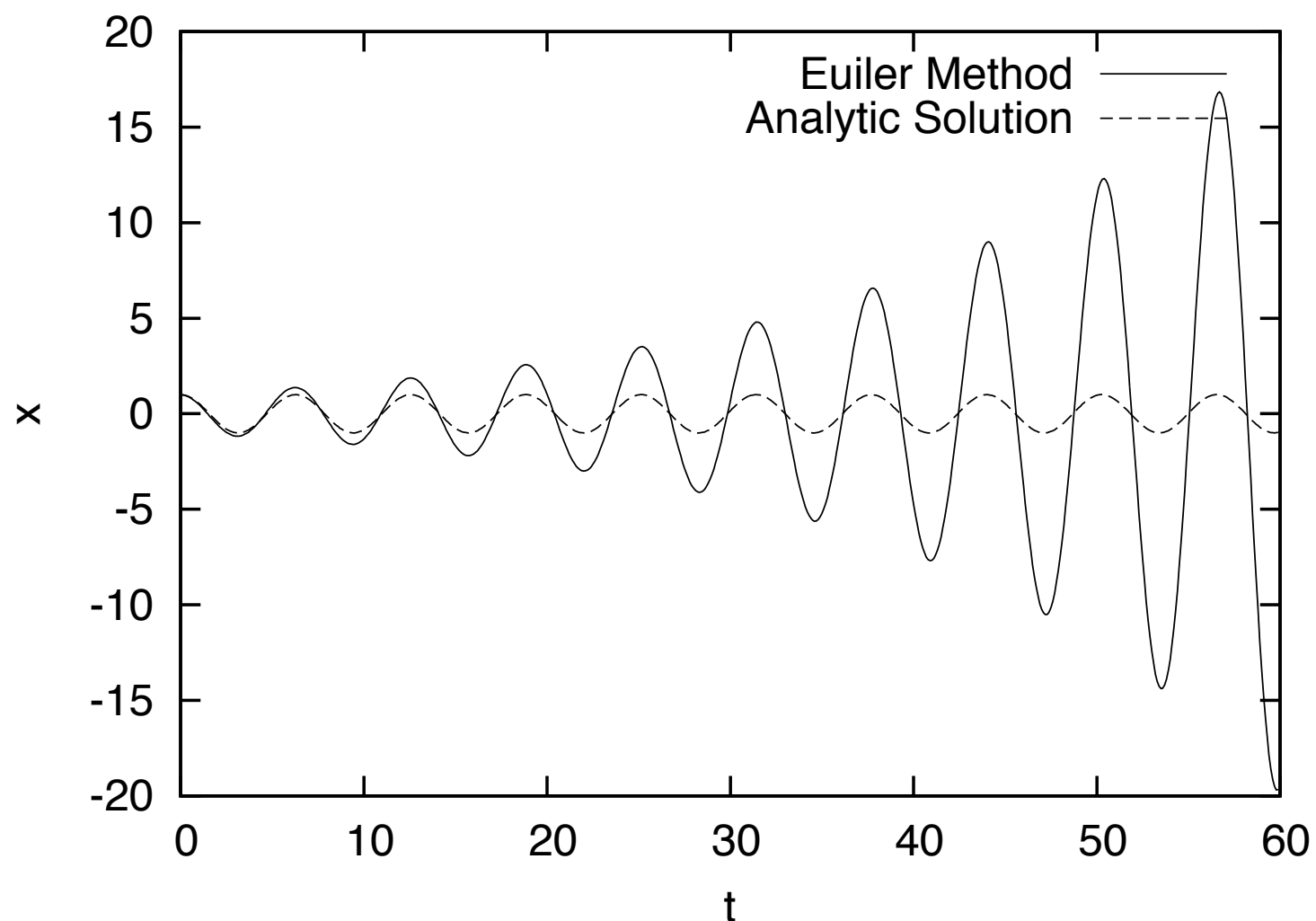
オイラー法

$$\frac{d^2x}{dt^2} = -x$$
$$v_0 = 0, x_0 = 1$$



厳密解

$$x = \cos t$$



オイラー法の誤差

- オイラー法は接線近似を仮定している
 - タイムステップを短くするほど精度が良くなる

誤差の定量的評価

$x(t_{i+1})$ を厳密解、 x_{i+1} を数値解とする。このとき

$$\text{誤差} = x(t_{i+1}) - x_{i+1} = O(\Delta t^{m+1}) = \text{定数} \times \Delta t^{m+1}$$

とかけると、この数値計算法は m 次であるという

オイラー法の誤差

誤差の定量的評価

$x(t_{i+1})$ を厳密解、 x_{i+1} を数値解とする。このとき
誤差 $= x(t_{i+1}) - x_{i+1} = O(\Delta t^{m+1}) = \text{定数} \times \Delta t^{m+1}$
とかけると、この数値計算法は**m次**であるという

オイラー法は**1次**の解法

$$x_{n+1} = x(t_n) + \Delta t f(x, t) + O(\Delta t^2)$$

dtを半分にすると誤差もおよそ半分になる

オイラー法の誤差

オイラー法の1ステップ当たりの誤差は $O(\Delta t^2)$

$$x_{n+1} = x(t_n) + \Delta t f(x, t) + O(\Delta t^2)$$

一方、計算時間 T の間に行う逐次計算の回数は

$$N = T/\Delta t$$

つまり、計算全体では逐次計算の誤差が積み上がっていく事になるので

$$O(\Delta t^2) \times N \sim O(\Delta t^2) \times O(\Delta t^{-1}) \sim O(\Delta t)$$

局所誤差と大域誤差

局所誤差

タイムステップ Δt の間に蓄積する誤差

厳密解: $x(t_{i+1})$ と数値解: x_{i+1} のとき

m次の局所誤差は $x(t_{i+1}) = x_{i+1} + O(\Delta t^{m+1})$ の関係を満たす

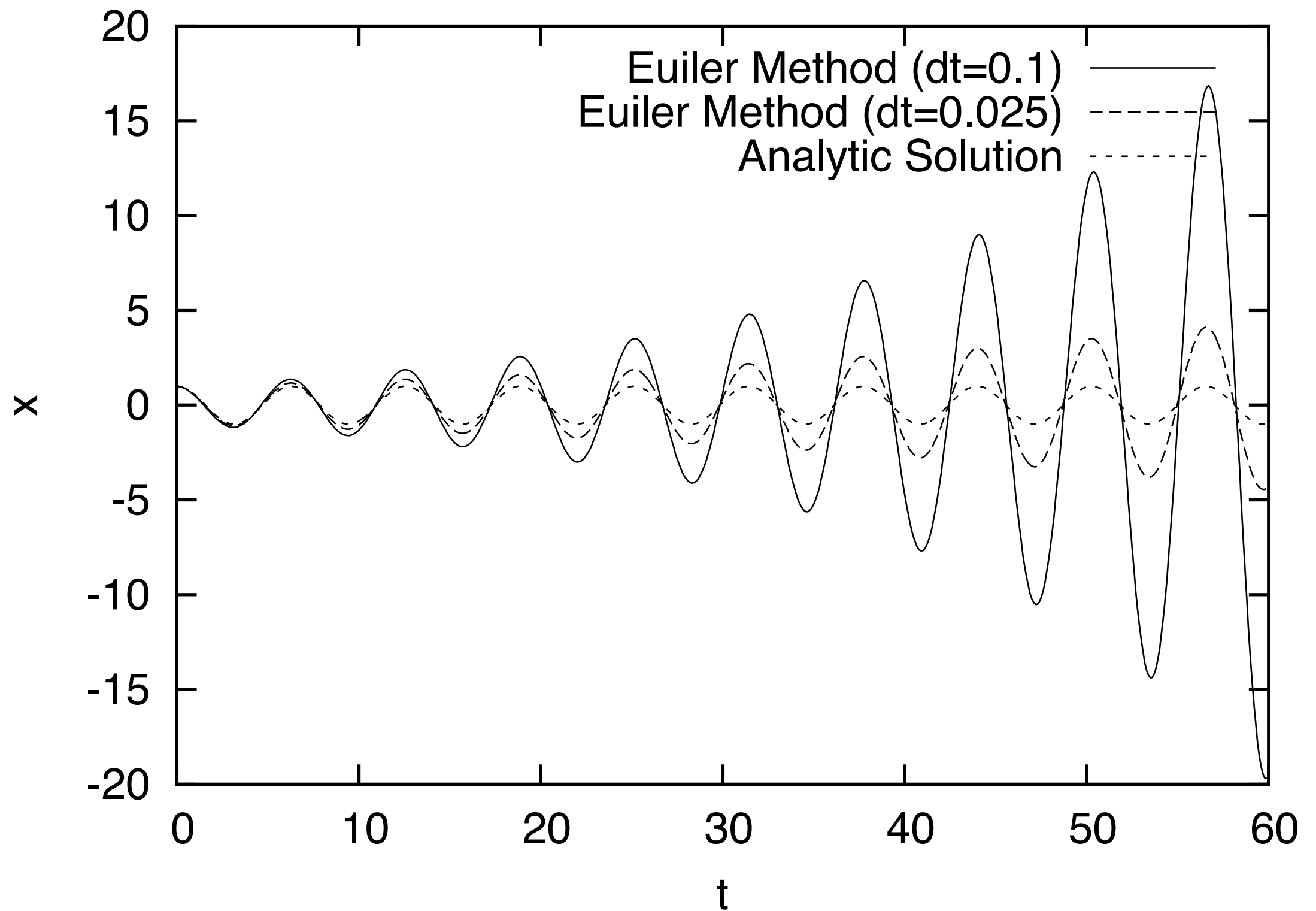
大域誤差

一定時間内で計算したときの誤差

$$O(\Delta t^{m+1}) \times t / \Delta t = O(\Delta t^m)$$

局所誤差の合計が
大域誤差となる

オイラー法の誤差



オイラー法の誤差

- 誤差を減らすにはタイムステップを小さくする
- タイムステップを小さくすると計算量が増加する
- タイムステップを小さくしていくと丸め誤差の影響が出る

より高精度な計算をするには

- 高次の解法 (ルンゲクッタ法、予測子修正子法、リチャードソン補外など)
- 考える系の構造や性質に着目する
(後ほどハミルトン系の解法で詳しく説明)

二次のルンゲクッタ法

計算法

$$\begin{aligned}k_1 &= \Delta t f(x_n, t_n), \\k_2 &= \Delta t f(x_n + \Delta t/2, t_n + k_1/2), \\x_{n+1} &= x_n + k_2\end{aligned}$$

1. 半分のタイムステップまで計算を行う
2. その導関数を用いて本ステップを計算する

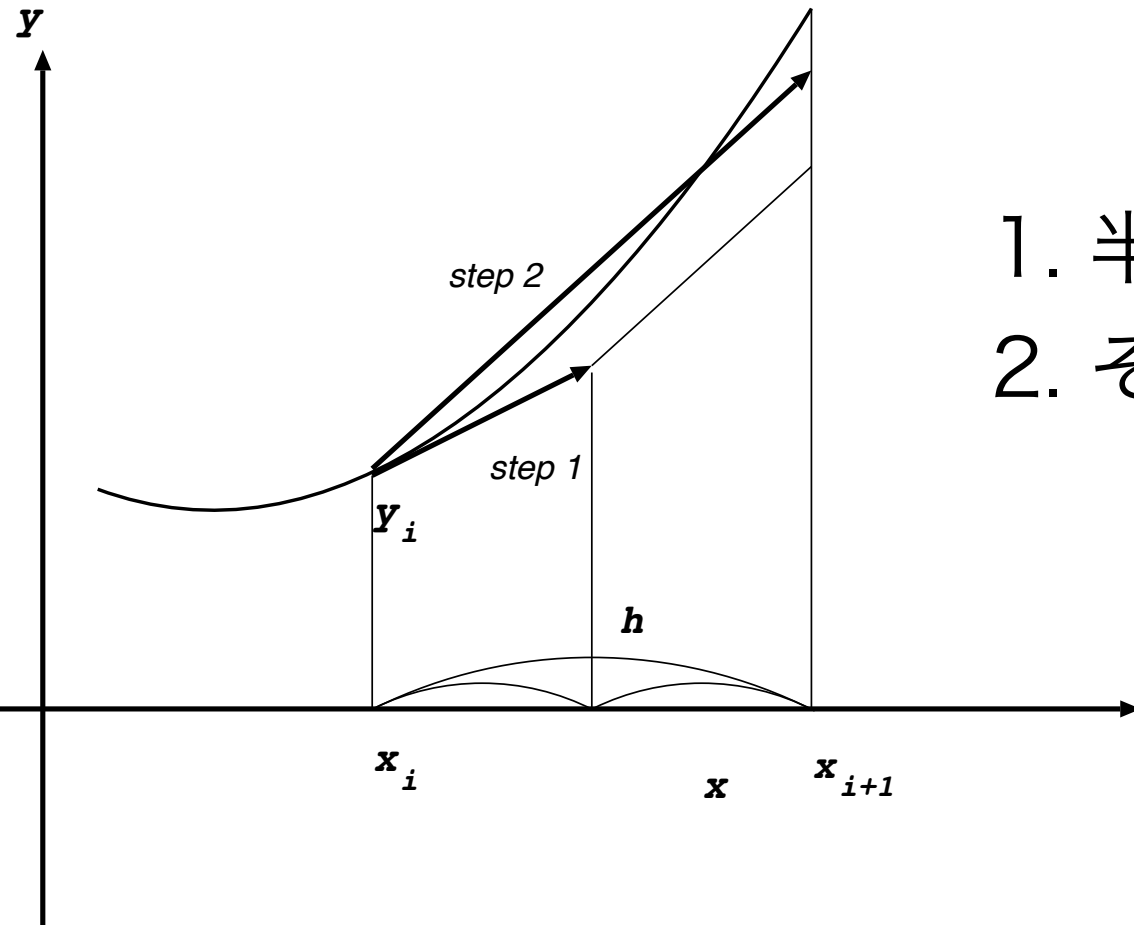
この計算法は二次の解法であるため、タイムステップを小さくするとオイラー法より誤差が小さくなる

一方、誤差の変化量が大きいため、タイムステップが大きいときはオイラー法より精度が悪くなることもある

二次のルンゲクッタ法

計算法

$$\begin{aligned}k_1 &= \Delta t f(x_n, t_n), \\k_2 &= \Delta t f(x_n + \Delta t/2, t_n + k_1/2), \\x_{n+1} &= x_n + k_2\end{aligned}$$

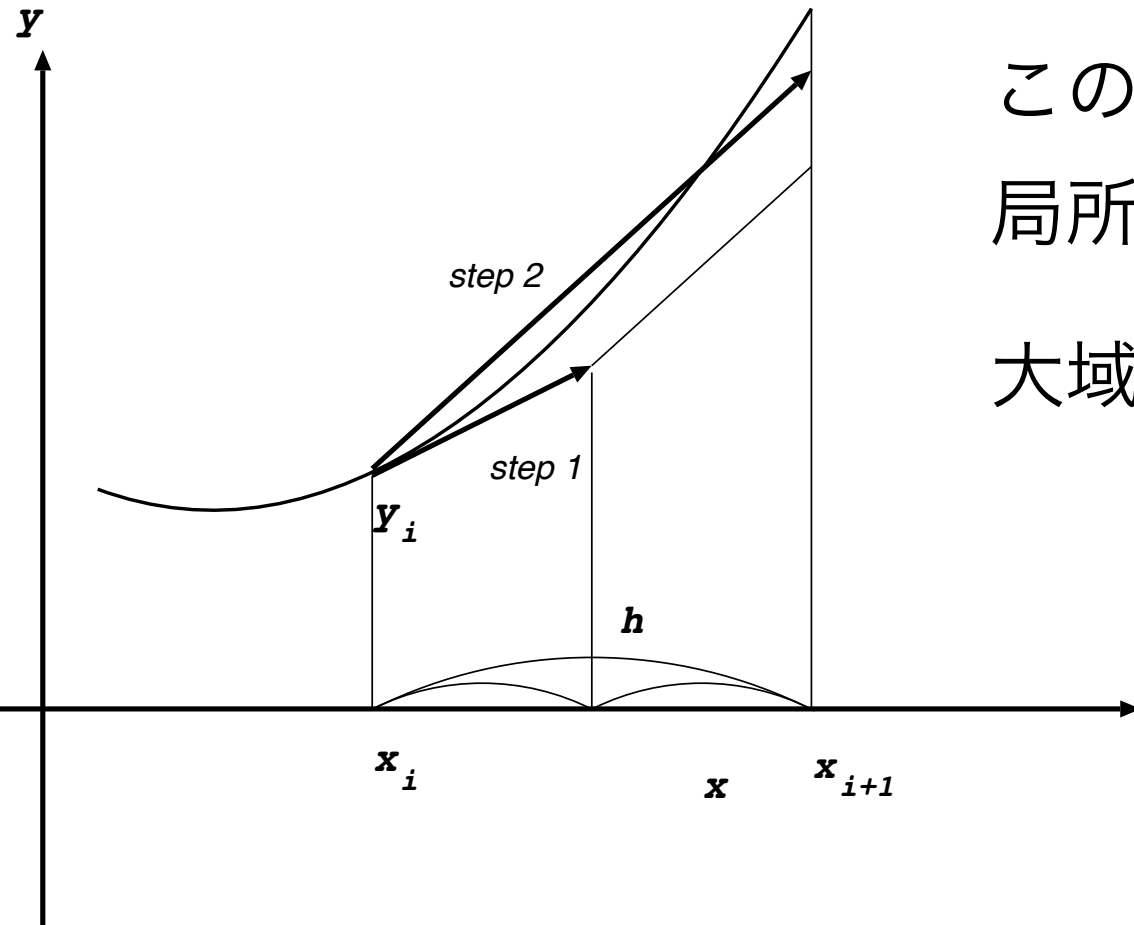


1. 半分のタイムステップで導関数を計算
2. その導関数を用いて本ステップを計算

二次のルンゲクッタ法

計算法

$$\begin{aligned}k_1 &= \Delta t f(x_n, t_n), \\k_2 &= \Delta t f(x_n + \Delta t/2, t_n + k_1/2), \\x_{n+1} &= x_n + k_2\end{aligned}$$



この計算法の次数は 2 次。つまり
局所誤差 $= x(t_{i+1}) - x_{i+1} = O(\Delta t^3)$

大域誤差 $= x(t) - x_N = O(\Delta t^2)$

中点法とホイン法

2次のルンゲクッタ法には以下の2つの方法がある

中点法

$$k_1 = \Delta t f(x_n, t_n)$$

$$k_2 = \Delta t f(x_n + k_1/2, t_n + \Delta t/2)$$

$$x_{n+1} = x_n + k_2$$

ホイン法

$$k_1 = \Delta t f(x_n, t_n)$$

$$k_2 = \Delta t f(x_n + k_1, t_n + \Delta t)$$

$$x_{n+1} = x_n + \frac{1}{2}(k_1 + k_2)$$

古典的ルンゲクッタ法

- 最も広く用いられている常微分解法

計算法

$$k_1 = f(x_n, t_n),$$

$$k_2 = f(x_n + \Delta t k_1 / 2, t_n + \Delta t / 2),$$

$$k_3 = f(x_n + \Delta t k_2 / 2, t_n + \Delta t / 2),$$

$$k_4 = f(x_n + \Delta t k_3, t_n + \Delta t),$$

$$x_{n+1} = x_n + k_1 / 6 + k_2 / 3 + k_3 / 3 + k_4 / 6$$

古典的ルンゲクッタ法

- 4段公式で到達可能な4次の公式
- 係数が簡単で計算量も少ない
- 5次以上では次数<段数となる

オイラー法より精度が良く、タイムステップに対して誤差の減少が大きい

計算のステップ数が増えると計算誤差も増加する

高階の常微分方程式の解法

高階の微分方程式を計算する場合は、
1階の連立微分方程式に変更して計算を行う

$$\frac{d^2x}{dt^2} = f\left(x, \frac{dx}{dt}, t\right)$$

上記の微分方程式に対して、下記のような変数変換を行う

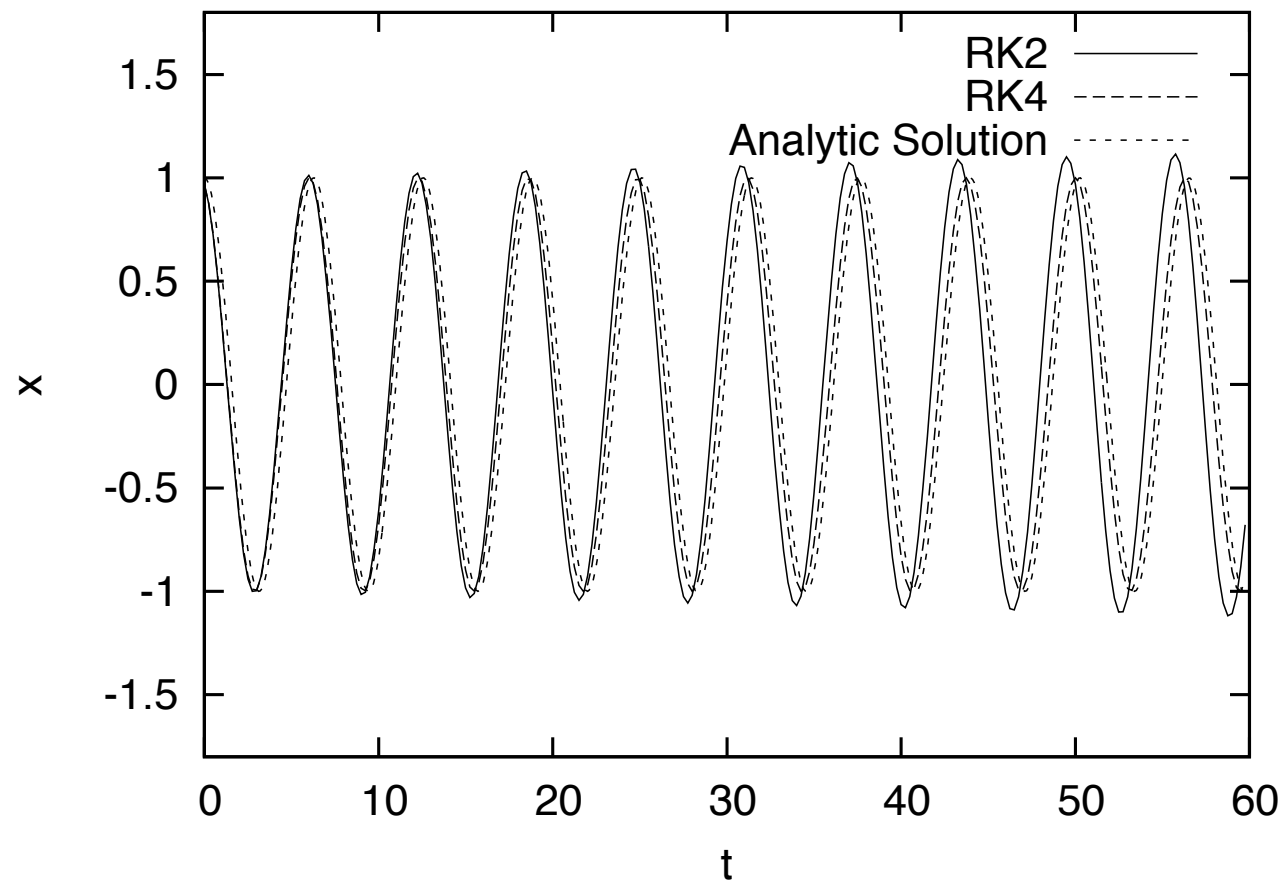
$$\begin{cases} X_0(t) = x(t) \\ X_1(t) = \frac{dx}{dt} = x'(t) \end{cases}$$

その結果、以下のような連立微分方程式が得られる

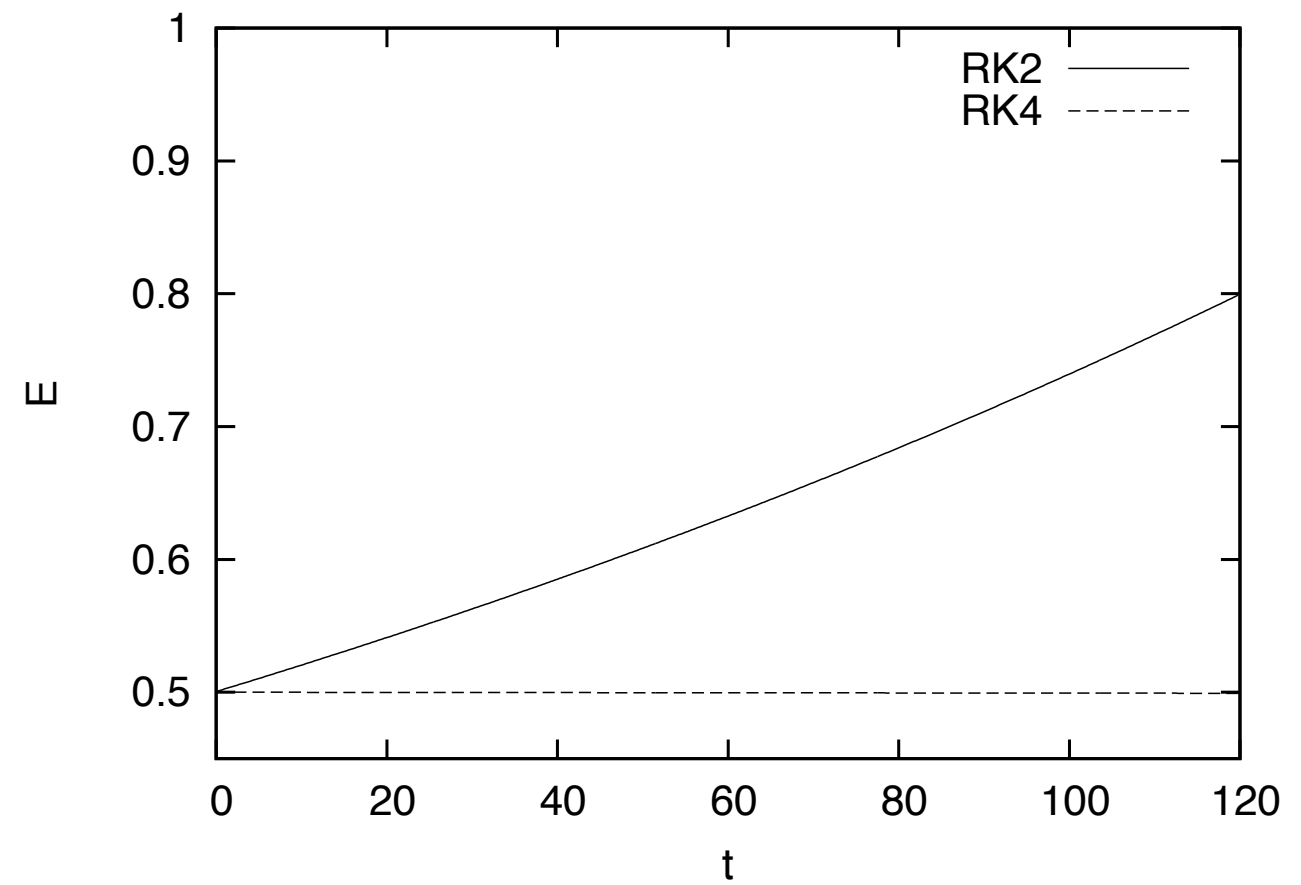
$$\begin{cases} \frac{X_0}{dt} = X_1 \\ \frac{X_1}{dt} = f(X_0, X_1, t) \end{cases}$$

ルンゲクッタ法の誤差

数値解



エネルギー誤差



N体シミュレーションの解法

基礎方程式

$$\frac{d^2 x}{dt^2} = \sum_{j \neq i}^N G m_j \frac{x_j - x_i}{|x_j - x_i|^3}$$

N体シミュレーションでは、粒子間の重力相互作用を計算する

重力計算の量は粒子数の二乗に比例する ($O(N^2)$ の計算)

N体シミュレーションの解法

無衝突系：近接相互作用が系の進化に影響しない

衝突系：近接相互作用が系の進化に影響する

衝突系の場合、近接相互作用を細かく計算する必要がある
そのため、高次の数値積分法が良く使われる
粒子数が増えると計算量が急激に増加するため、
重力計算を効率よく行う必要がある(GRAPEなど)

N体シミュレーションの解法

基礎方程式

$$\frac{d^2 x}{dt^2} = \sum_{j \neq i}^N G m_j \frac{x_j - x_i}{|x_j - x_i|^3}$$

- ルンゲクッタ法はどんな常微分方程式でも解ける
- N体シミュレーション考えるのはハミルトン系
→ **ハミルトン系専用**の数値解法で良い

例：調和振動子

一次元調和振動子 $H = \frac{1}{2}(p^2 + q^2)$

運動方程式 $\frac{dq}{dt} = p, \frac{dp}{dt} = -q$

この方程式の厳密解は相平面での角度 τ の回転で表せる

$$\begin{bmatrix} q(\tau) \\ p(\tau) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \tau & \sin \tau \\ -\sin \tau & \cos \tau \end{bmatrix} \begin{bmatrix} q(0) \\ p(0) \end{bmatrix}$$

この変換はJacobiの行列式が1となる



この変換は相平面での面積を保存する

例：調和振動子

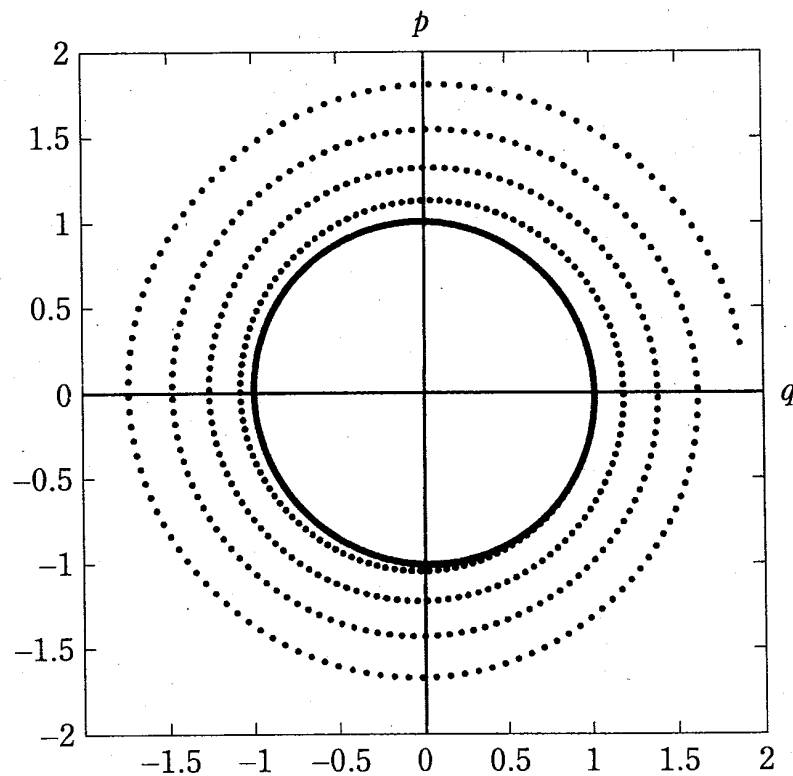
オイラー法

$$\begin{bmatrix} q' \\ p' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & \tau \\ -\tau & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} q \\ p \end{bmatrix}$$

シンプレクティック法

$$\begin{bmatrix} q' \\ p' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & \tau \\ -\tau & 1 - \tau^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} q \\ p \end{bmatrix}$$

- 共に厳密解に対して τ の1次まで一致
- シンプレクティック法は係数行列の行列式の値が1

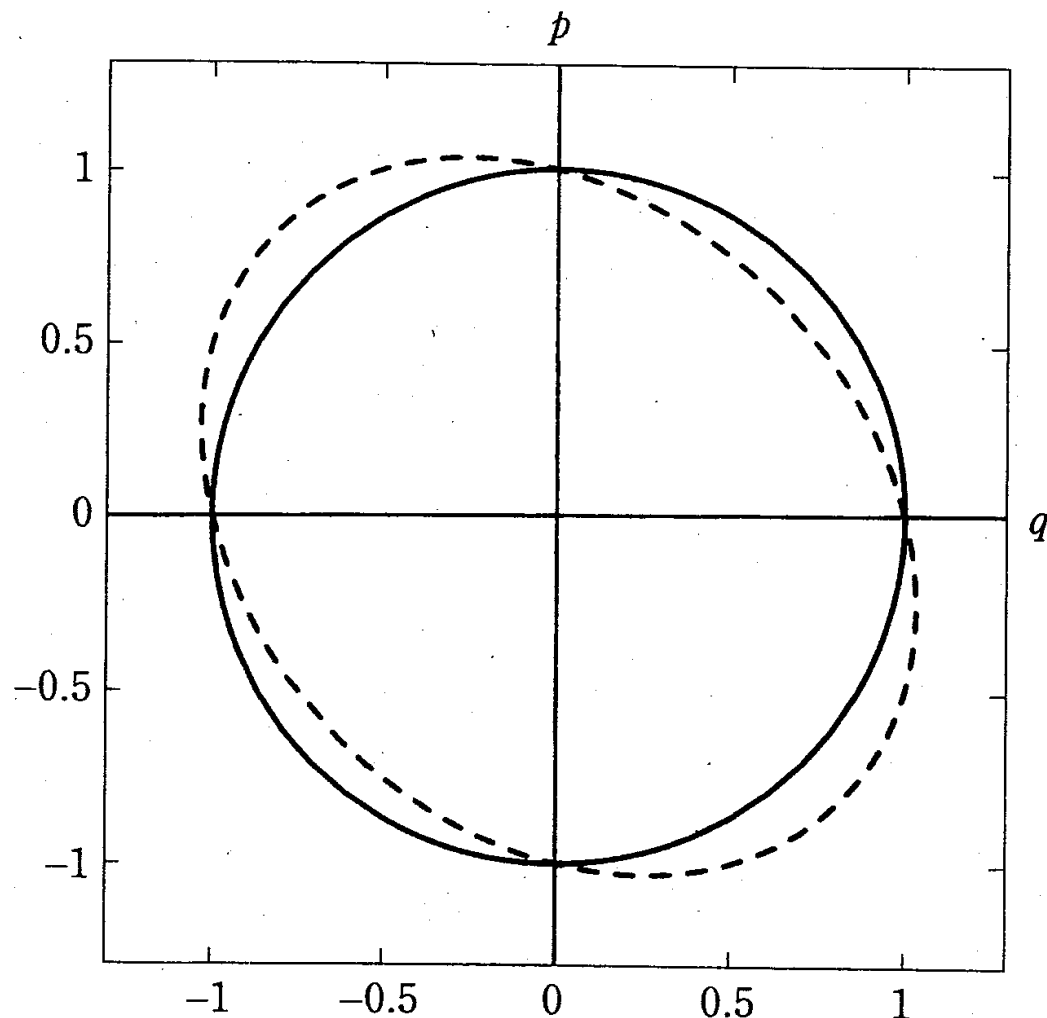


- オイラー法はエネルギーが1ステップごとに $(1 + \tau^2)$
- シンプレクティック法は厳密解に非常に近い

例：調和振動子

シンプレクティック法
$$\begin{bmatrix} q' \\ p' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & \tau \\ -\tau & 1 - \tau^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} q \\ p \end{bmatrix}$$

- シンプレクティック法に対して任意の座標変換を行う



$$\frac{1}{2}(p^2 + q^2) + \frac{\tau}{2}pq = \text{const}$$

- シンプレクティック法は厳密解に対して
45度傾いた楕円となる
→ 誤差が蓄積しない

リープフロッグ法

ハミルトニアン

$$H = T(p) + V(q)$$

に対するシンプレクティックな数値解法を考える

$$q' = q + \tau \left(\frac{\partial T}{\partial p} \right), p' = p - \tau \left(\frac{\partial V}{\partial q} \right)$$

$(q, p) \rightarrow (q', p)$, $(q', p) \rightarrow (q', p')$ の合成として得られる

シンプレクティック性

ある種のハミルトニアンにおいて、時間発展しても保存量を持つ

リープフロッグ法

Hamilton方程式を以下の形に書き直す

$$z = (q, p) \quad \frac{dz}{dt} = \{z, H(z)\}$$

ここで、関数FとGのPoisson括弧を以下のように定義する

$$\{F, G\} \equiv \Sigma(F_q G_p - F_p G_q)$$

また、関数Fに作用する微分作用素は以下のように定義できる

$$D_G F \equiv \{F, G\}$$

よってHamilton方程式はこの表記を使用すると

$$\frac{dz}{dt} = D_H Z$$

リープフロッグ法

時間0から τ までの時間発展は

$$z(\tau) = [\exp(\tau D_H)]z(0)$$

$H = T(p) + V(q)$ の形のハミルトニアンを考慮した場合

形式解は $z(\tau) = \exp[\tau(D_T + D_V)]z(0)$

$$D_H = D_T + D_V$$

D_T と D_V は非可換である事に注意

以下の2つの時間発展はそれぞれシンプレクティックであるので

$$z(\tau) = \exp(\tau D_T)z(0) \quad z(\tau) = \exp(\tau D_V)z(0)$$

その作用の合成についてもシンプレクティックとなる

$$z(\tau) = \exp(\tau D_T) \exp(\tau D_V)z(0)$$

リープフロッグ法

この時間発展は以下の関係式から τ の1次の精度を持つ

$$\exp[\tau(A + B)] = \exp(\tau A) \exp(\tau B) + O(\tau^2)$$

一般的に、非可換は作用素 X, Y で定義される Z について

$$\exp X \exp Y = \exp Z$$

Baker-Campbell-Hausdorffの公式が成り立つ

$$Z = X + Y + \frac{1}{2}[X, Y] + \dots$$

この公式を用いると、2次のシンプレクティック解法は以下のように書ける

$$\exp[\tau(D_T + D_V)] = \exp\left(\frac{\tau}{2}D_T\right) \exp(\tau D_V) \exp\left(\frac{\tau}{2}D_T\right) + O(\tau^3)$$

リープフロッグ法

計算法

$$v_{i+1/2} = v_i + a(x_i) \frac{\Delta t}{2},$$

$$x_{i+1} = x_i + v_{i+1/2} \Delta t,$$

$$v_{i+1} = v_{i+1/2} + a(x_{i+1}) \frac{\Delta t}{2}$$

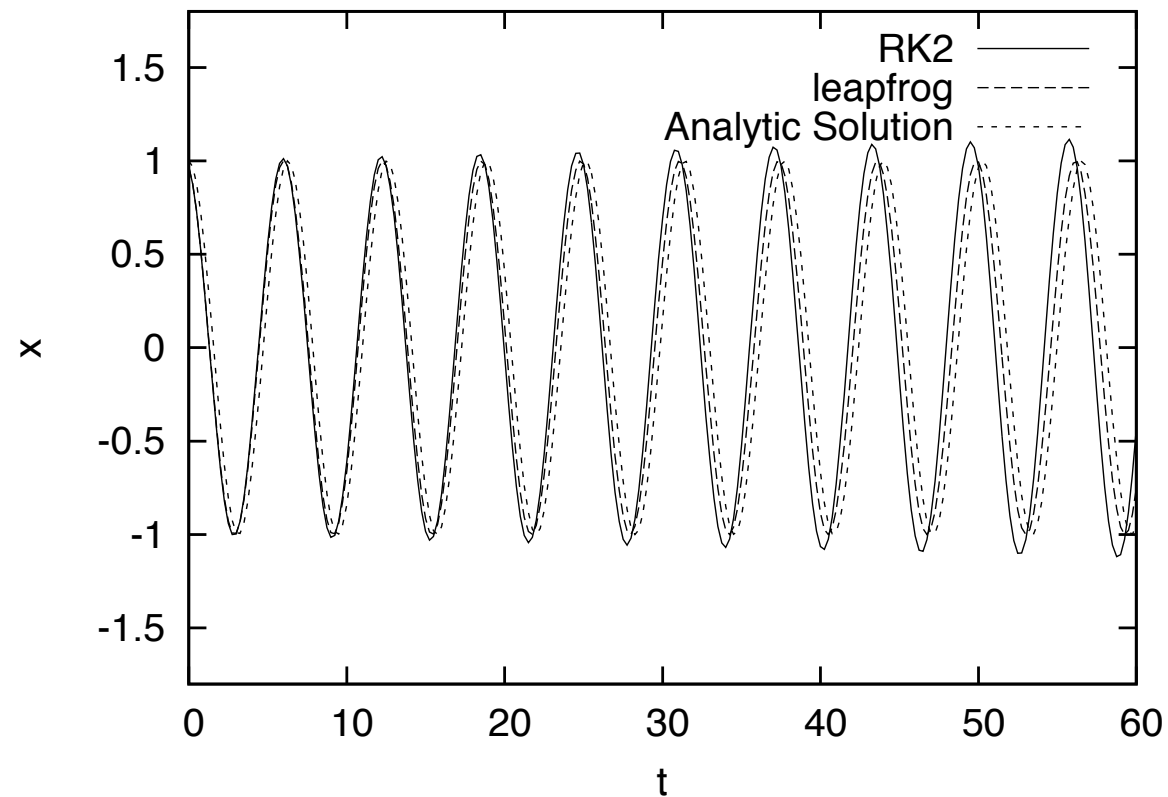
特徴

二次のシンプレクティック公式

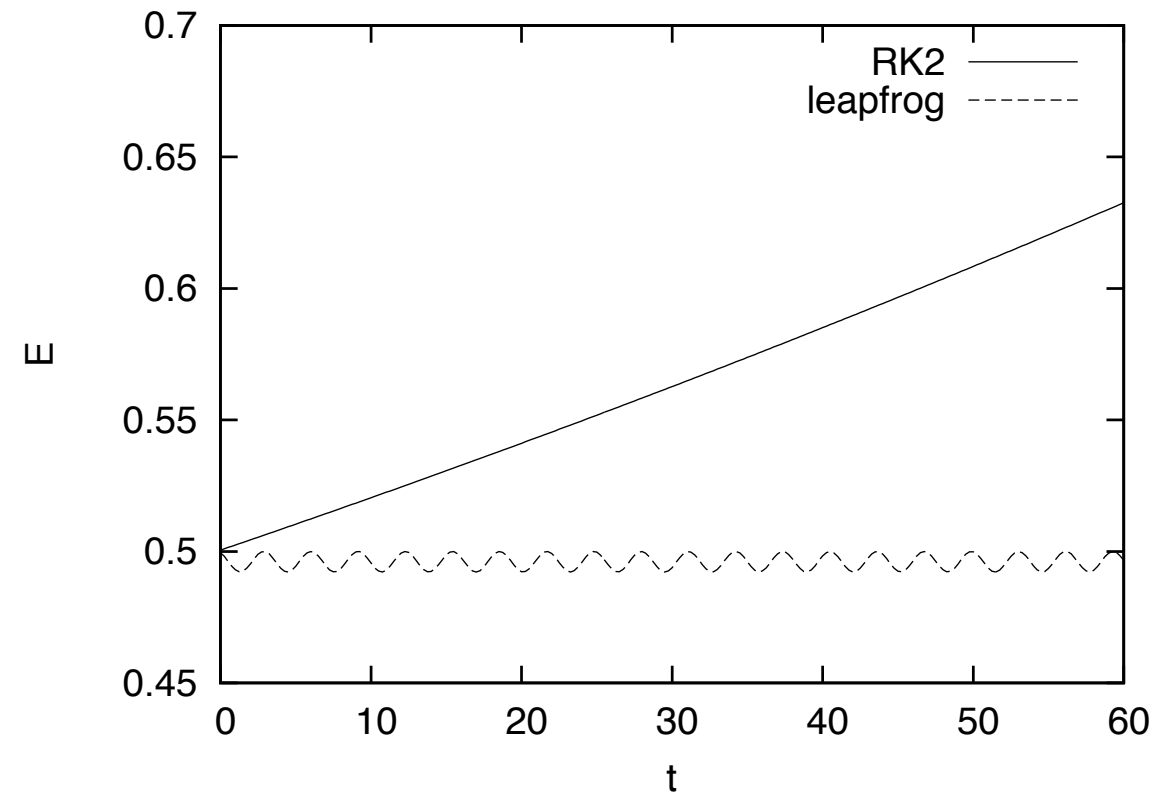
長時間計算におけるエネルギー誤差の蓄積が無い

リープフロッグ法

数値解



エネルギー誤差



特徴

二次のシンプレクティック公式

長時間計算におけるエネルギー誤差の蓄積が無い

局所誤差は古典的ルンゲクッタ法より悪い

まとめ

- 数値計算法の基礎
 - 単精度、倍精度の意味 誤差 (情報落ち、桁落ち)
- 微分方程式の解法の基本及び局所誤差と大域誤差
 - 公式の次数を定義した
 - オイラー法は1次
 - 古典ルンゲクッタは4次
- N 体シミュレーション用の解法
 - リープフロッグ法は2次
 - シンプレクティック性： **誤差が蓄積されない**