2023(令和5)年度 N体シミュレーション立春の学校

常微分方程式の数値解法
の基礎の初歩の触りの一部

2024(令和6)年 2月13日

伊藤孝士（国立天文台天文シミュレーションプロジェクト）

お願い・講義品質向上のため録画のご許可をお願いします (公開等は行いません)

このファイルの最終修正日時：2024年2月12日(月) 23時43分0秒 JST

前半の構成

数値計算の誤差、一般論、各種の定義

オイラー法

精度の向上

ルンゲクッタ法など

後半へ
(正準形式の解法)

数値計算の誤差

数値計算の誤差 (1)

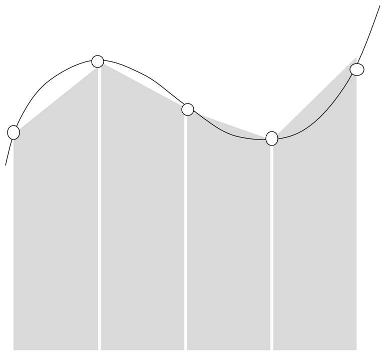
- 物理法則の表現 → 連続関数

- 計算機内での操作は離散的
    - 計算の打ち切り(妥協)
        - 無限級数をどこかの次数で打ち切る
        - 曲線的な図形を多角形で近似する
        - ：

- この操作による誤差 → 打ち切り誤差
    - 本講義が言及する誤差(精度)は専らこれ

$$y(x_0 + h) = y(x_0) + \frac{h}{1!}y'(x_0) + \frac{h^2}{2!}y''(x_0) + \frac{h^3}{3!}y'''(x_0) + \cdots$$

無限級数の打ち切り



多角形による近似

数値計算の誤差 (2)

計算機内の小数点表現は有限桁

- $4.6875 = 4 + 0.5 + 0.125 + 0.0625$
  $= 1*2^{2} + 0*2^{1} + 0*2^{0} + 1*2^{-1} + 0*2^{-2} + 1*2^{-3} + 1*2^{-4}$
  → 100.1011 (二進法表現)

有限のビット数では有限個の数しか表現できない

- 1ビット → 2^{1} = 2 種類
- 2ビット → 2^{2} = 4 種類
- ：
- 7ビット → 2^{7} = 128 種類
- :

数値計算の誤差 (2)

現代の標準規格 IEEE754

- 単精度 (24ビット相当)
  - 2^{24} = 16777216 種類 → $\log_{10}(2^{24}) \sim$ 7.22桁
- 倍精度 (53ビット相当)
  - 2^{53} = 9007199254740992種類 → $\log_{10}(2^{53}) \sim$15.95桁

数は無限にある

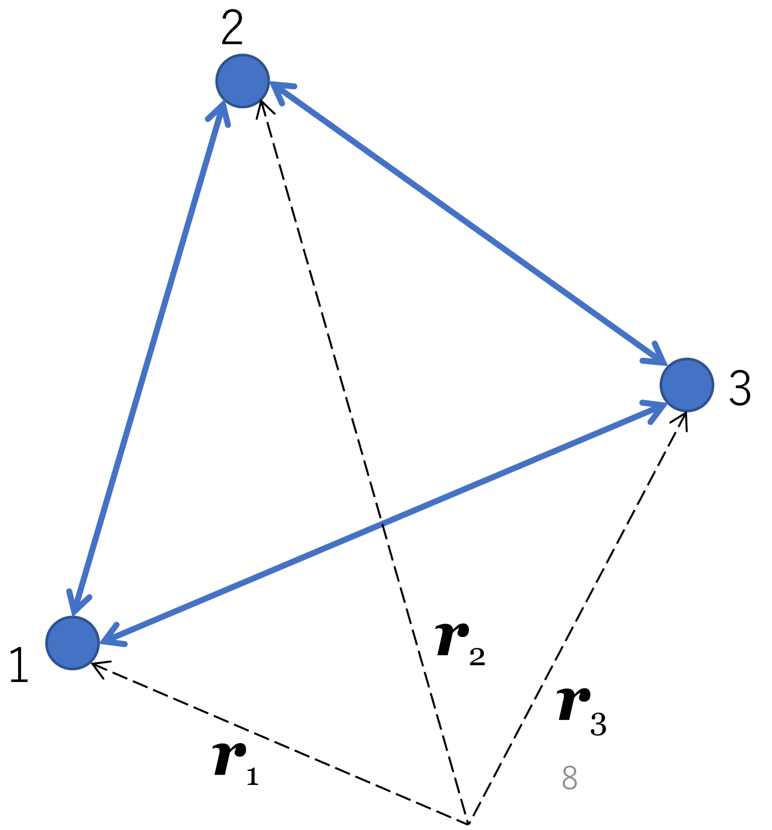
- そのうち幾つかしか表現できない
- 近い数値で代表させる → 「丸める」→ 丸め誤差

一般論と前置き

(重力)N体問題の運動方程式

$$m_i \frac{d^2 \boldsymbol{r}_i}{dt^2} = -G \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{N} m_i m_j \frac{\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j}{|\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j|^3}$$

- この講義で話すのは時間積分の部分
- 右辺(力)の計算については別講義で



常微分方程式の正規形

$$\frac{dy}{dx} = f(x, y)$$

または

$$y' = f(x, y)$$

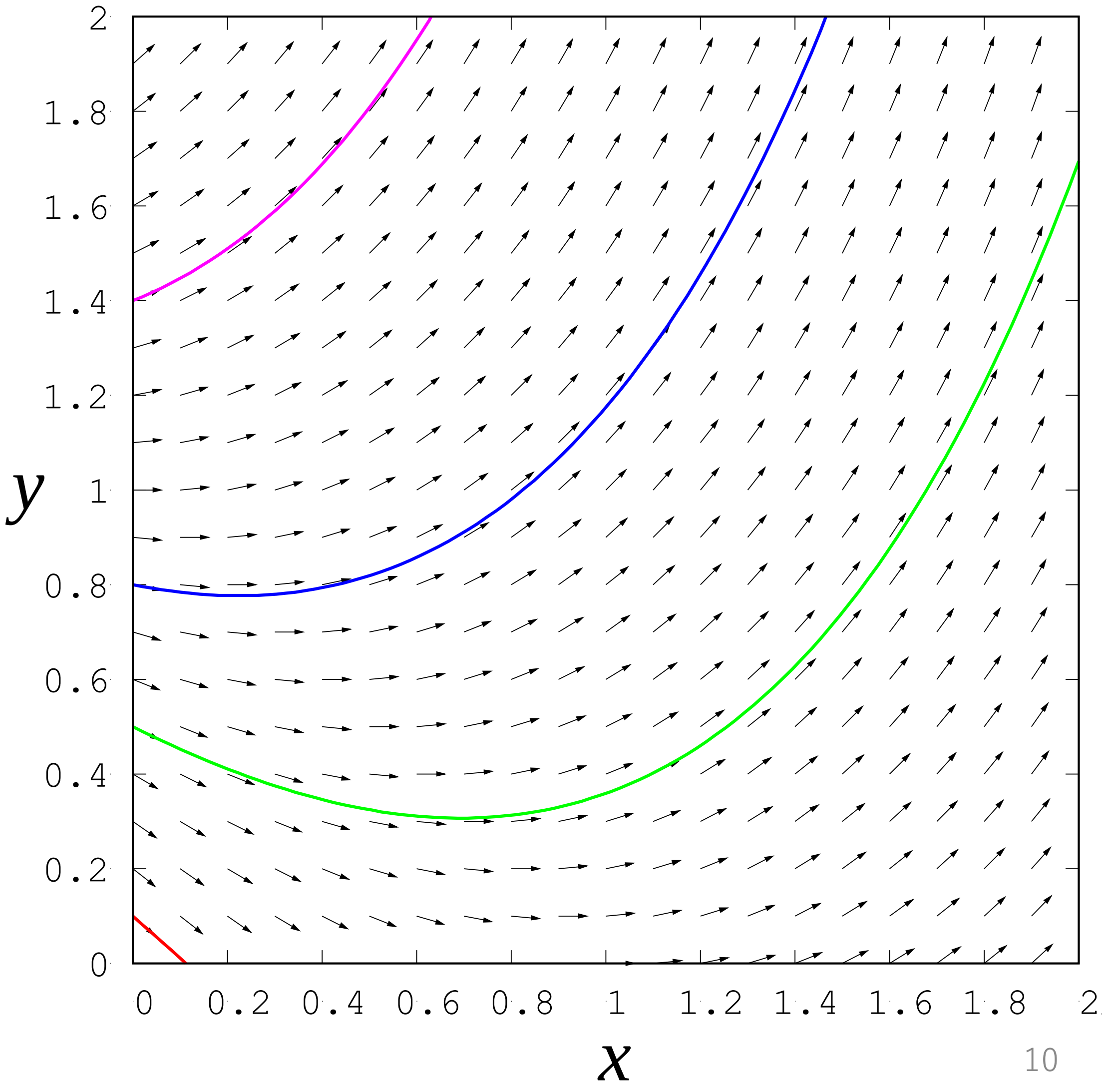
$x \to t$ (時刻)とすれば時間発展の形

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

注・時には x が従属変数として使われるが、
　　本講では市販の教科書たちと整合させるために y を従属変数とする

微分方程式の初期値問題

- $y' = f(x, y)$
- 「方向の場」
  - 初期値を与えればあとは
    そこからの流れに乗って進む
- 例. $y' = y + x - 1$
  - 解 $y = Ce^x - x$
  - 各色線は異なる初期値から



参考になるページ
http://www.phys.u-ryukyu.ac.jp/~maeno/sizensuugaku2016/lec17.html
https://www1.gifu-u.ac.jp/~tanaka/numerical_analysis.pdf

階数の下げ方

- 高階の微係数 $y, y', y'', y''', \dots y^{(n)}$ を含む場合
  - $y^{(n)} = f(x; y, y', y'', y''', \dots, y^{(n-1)})$
- 0階, 1階, …, n-1階の微係数を別個の従属変数と見做す
  - $y \to y_0,\ y' \to y_1,\ y'' \to y_2,\ \dots,\ y^{(n-2)} \to y_{n-2},\ y^{(n-1)} \to y_{n-1}$
- 新しい従属変数で書き直す
  - $y'_{n-1} = f(x; y_0, y_1, y_2, \dots, y_{n-1})$ ←y_{n-1}に関する一階常微分方程式
  - $y'_{n-2} = y_{n-1}$ ←y_{n-2}に関する一階常微分方程式
  - :
  - $y'_1 = y_2$
  - $y'_0 = y_1$

→ n 本の連立一階常微分方程式

- 「階数」 = order

階数の下げ方

例. 三階の常微分方程式

$$y''' + 3yy'' = 0$$

変数の置き換え

$$y \to y_0, \quad y' \to y_1, \quad y'' \to y_2$$

以下の連立一階常微分方程式に変換し、解く

$$\begin{cases} y_2' = -3y_0 y_2, \\ y_1' = y_2, \\ y_0' = y_1 \end{cases}$$

$$m_i \frac{d^2 \boldsymbol{r}_i}{dt^2} = -G \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{N} m_i m_j \frac{\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j}{|\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j|^3}$$

重力N体問題では

運動方程式 → 変数 $\boldsymbol{r}$ に関する二階の常微分方程式

$$\frac{d^2 \boldsymbol{r}}{dt^2} = f(t; \boldsymbol{r})$$

速度 $\boldsymbol{v}$ を新たな従属変数とし、階数を下げる

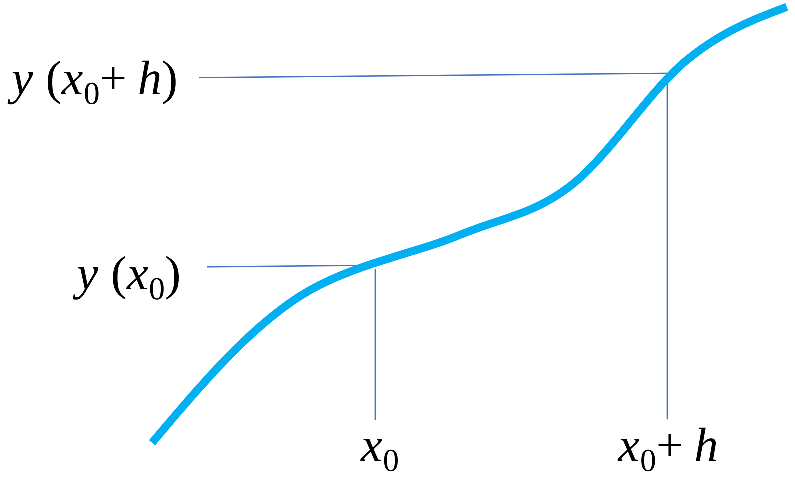
$$\begin{cases} \dfrac{d\boldsymbol{v}}{dt} = f(t; \boldsymbol{r}), \\ \dfrac{d\boldsymbol{r}}{dt} = \boldsymbol{v} \end{cases}$$

常微分方程式を「解く」

$y' = f(x, y)$ を「解く」とは？

- 形式的には以下を求め続けること

$$y(x_0 + h) = y(x_0) + \int_{x_0}^{x_0+h} f(x, y(x))dx$$

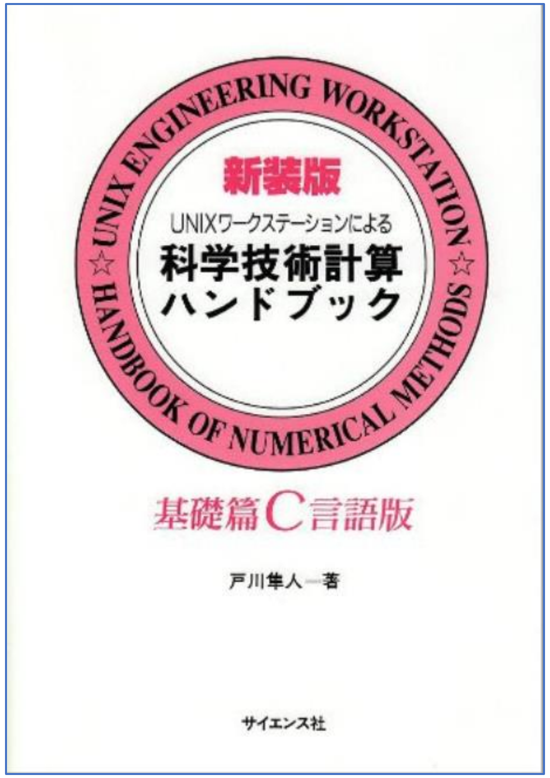


汎用的な解法群

汎用的な解法群

- 長い研究史があり、多くの成果があり、とても奥深い
  - 電子計算機の登場よりずっと前から

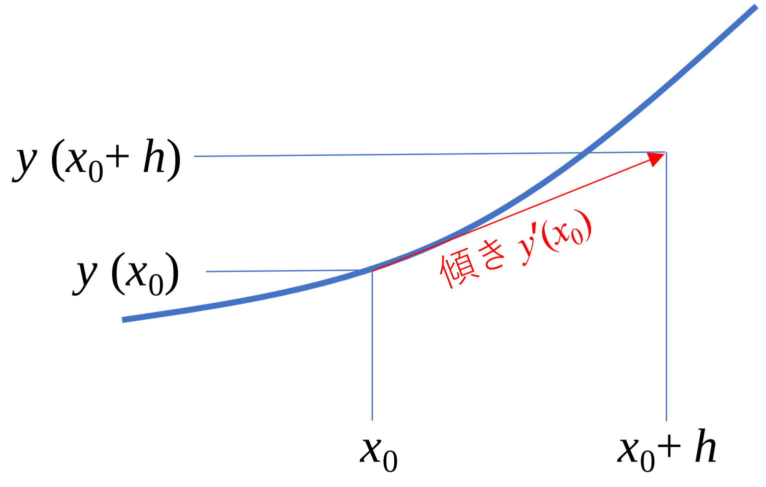
- この講義(前半部)が沿う書籍 →
- 本学校の過去の講義録も参照



簡単な方法

その場の傾きから次の値を予想する

$$y(x_0+h)=y(x_0)+hf(x_0,y(x_0))$$



テイラー展開の一次項と等価

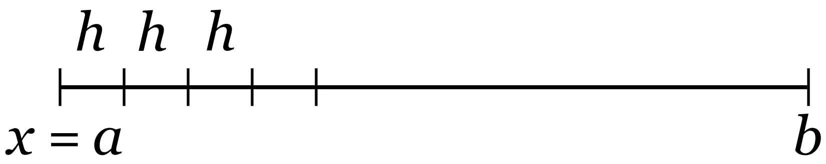
$$y(x_0+h)=y(x_0)+\frac{h}{1!}y'(x_0)+\frac{h^2}{2!}y''(x_0)+\frac{h^3}{3!}y'''(x_0)+\cdots$$

「オイラー法」

オイラー法の精度

1ステップ(h)あたりの誤差 (局所誤差)

- $O(h^2)$



$x = a$ から $x = b$ までステップ h で進む

- ステップの総数 = $(b\text{-}a) / h$

全ステップで発生する誤差 (大域誤差)

- $O(h^2) * (b\text{-}a) / h \rightarrow O(h^1)$

→ オイラー法の精度は一次 $O(h^1)$

- 「次数」 = order (時にdegree)
  - k次の方法が持つ局所誤差 = $O(h^{k+1})$

実例

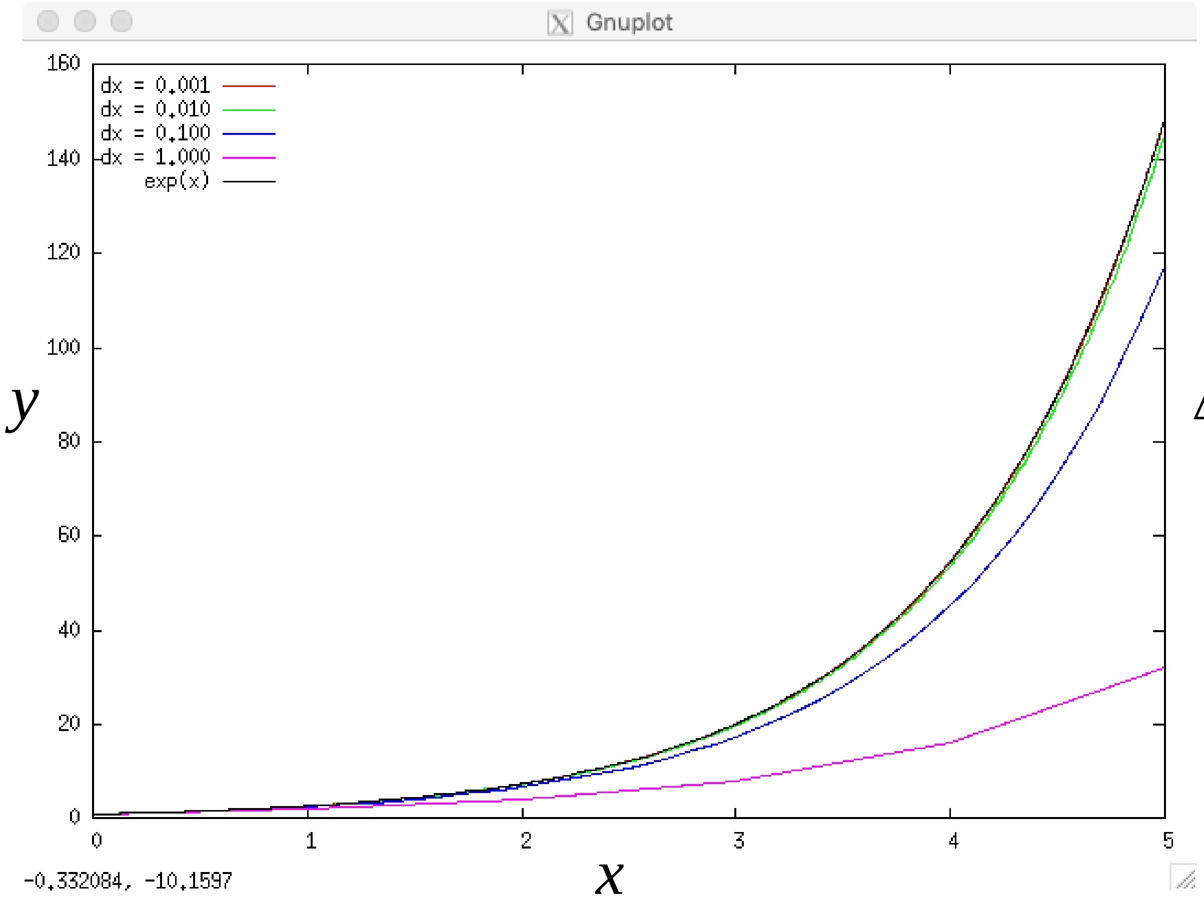
- 常微分方程式 $y' = y$
- 初期条件 $(x, y) = (0, 1)$
- 厳密解あり $y = e^x$

```
BEGIN{
 #dx   =  0.10  # from the command line
  x0   =  0.0   # initial value
  y0   =  1.0   # initial value
  xmax = 10.0
  printf("%e %e %e\n", x0, y0, 0)
}

{
  x = x0
  y = y0
  while (x < xmax){
    y += fxy(x,y)*dx
    x += dx
    printf("%e %e %e\n", x, y, fabs(y-yas(x)))
  }
}
```

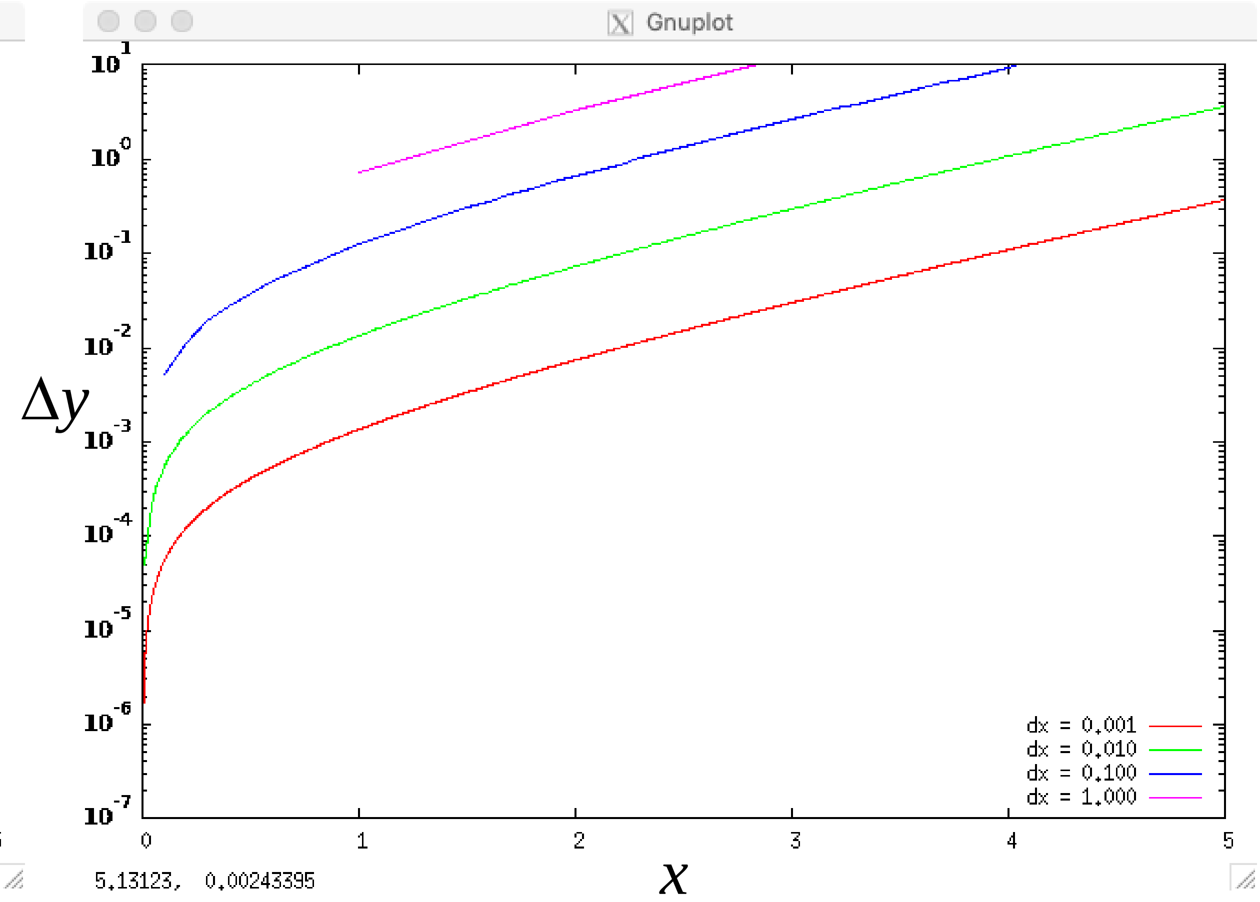
```
# y' = dy/dx = f(x,y)
function fxy(x,y){
  return y
}

# analytic solution of y(x)
function yas(x){
  return exp(x)
}

# absolute value
function fabs(x){
  if   (x >= 0) return  x
  else          return -x
}
```

実例

$y = e^x$ との比較



$y = e^x$ との差分



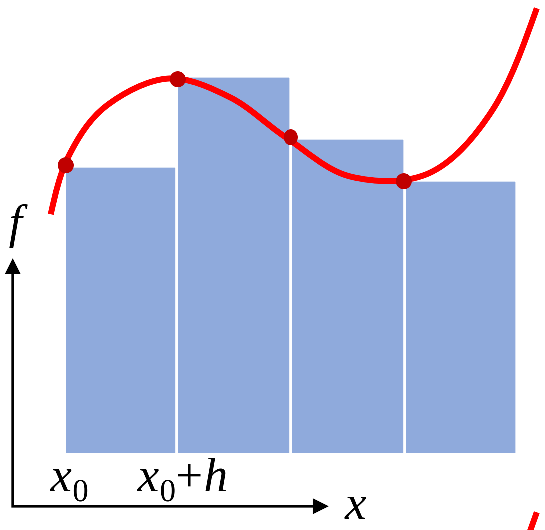
(オイラー法) 精度の向上

- 形式的な解

$$y(x_0+h) = y(x_0) + \int_{x_0}^{x_0+h} f(x, y(x))dx$$

- オイラー法

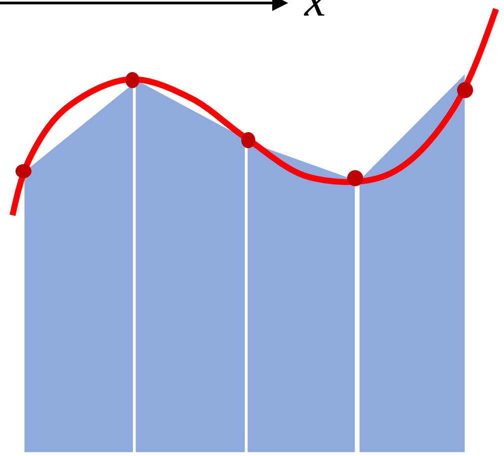
$$\int_{x_0}^{x_0+h} f(x, y(x))dx \to hf(x_0, y(x_0))$$



- 台形で近似できればもっと良い

$$\int_{x_0}^{x_0+h} f(x, y(x))dx$$

$$\to \frac{h}{2}\left(f(x_0, y(x_0)) + f(x_0+h, y(x_0+h))\right)$$



(オイラー法) 精度の向上

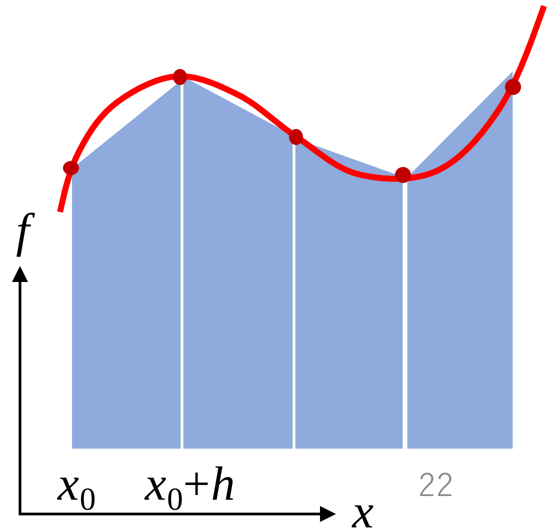
予想値をオイラー法で求め、台形の面積を計算する

$$\overline{y(x_0+h)} = y(x_0) + hf(x_0, y(x_0))$$ ← $y(x_0+h)$ の予想値 (オイラー法)

$$y(x_0+h) = y(x_0) + \frac{h}{2}\left(f(x_0, y(x_0)) + f(x_0+h, \overline{y(x_0+h)})\right)$$

テイラー展開と比較すると（各自やってみましょう）

- 1ステップ(h)あたりの誤差 → $O(h^3)$
- 全ステップで発生する誤差 → $O(h^2)$



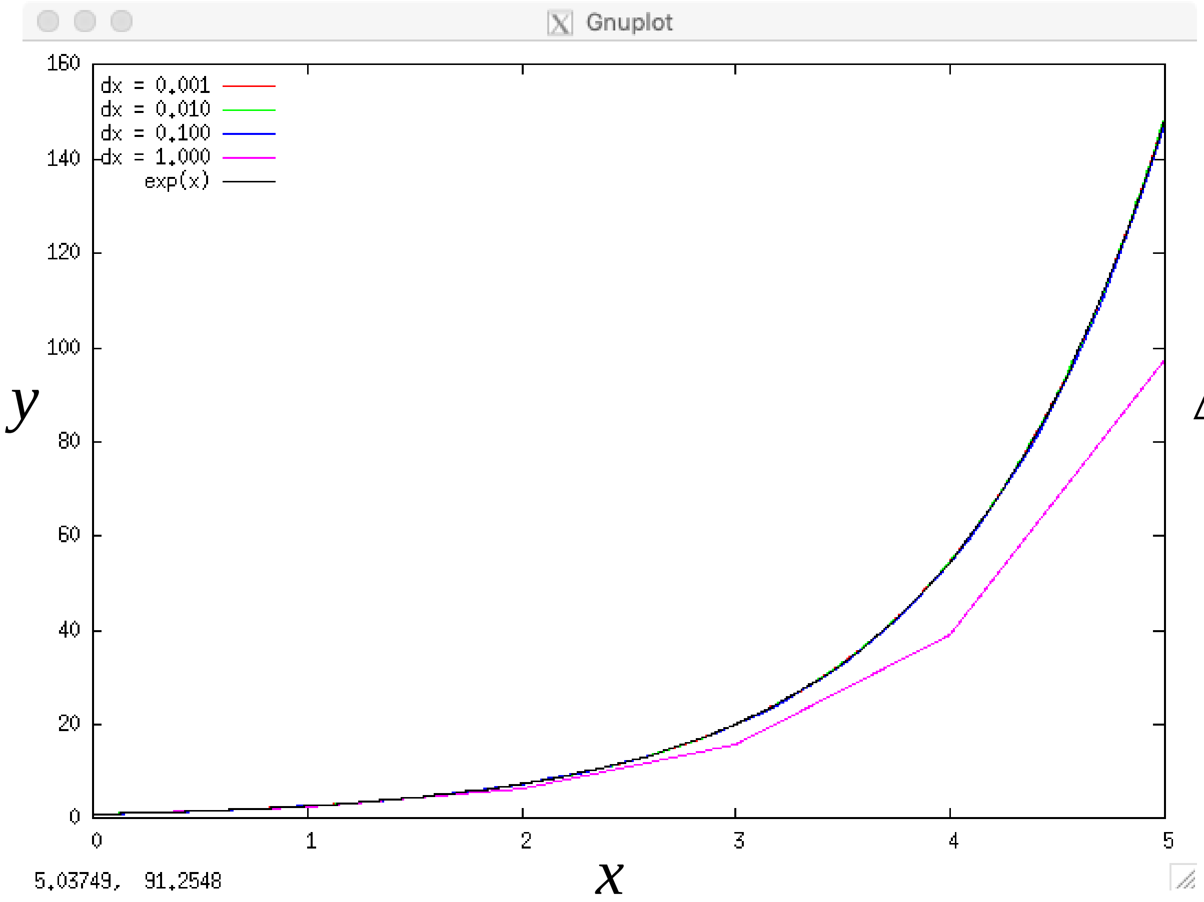
「修正オイラー法」、精度は二次 $O(h^2)$

(オイラー法) 精度の向上

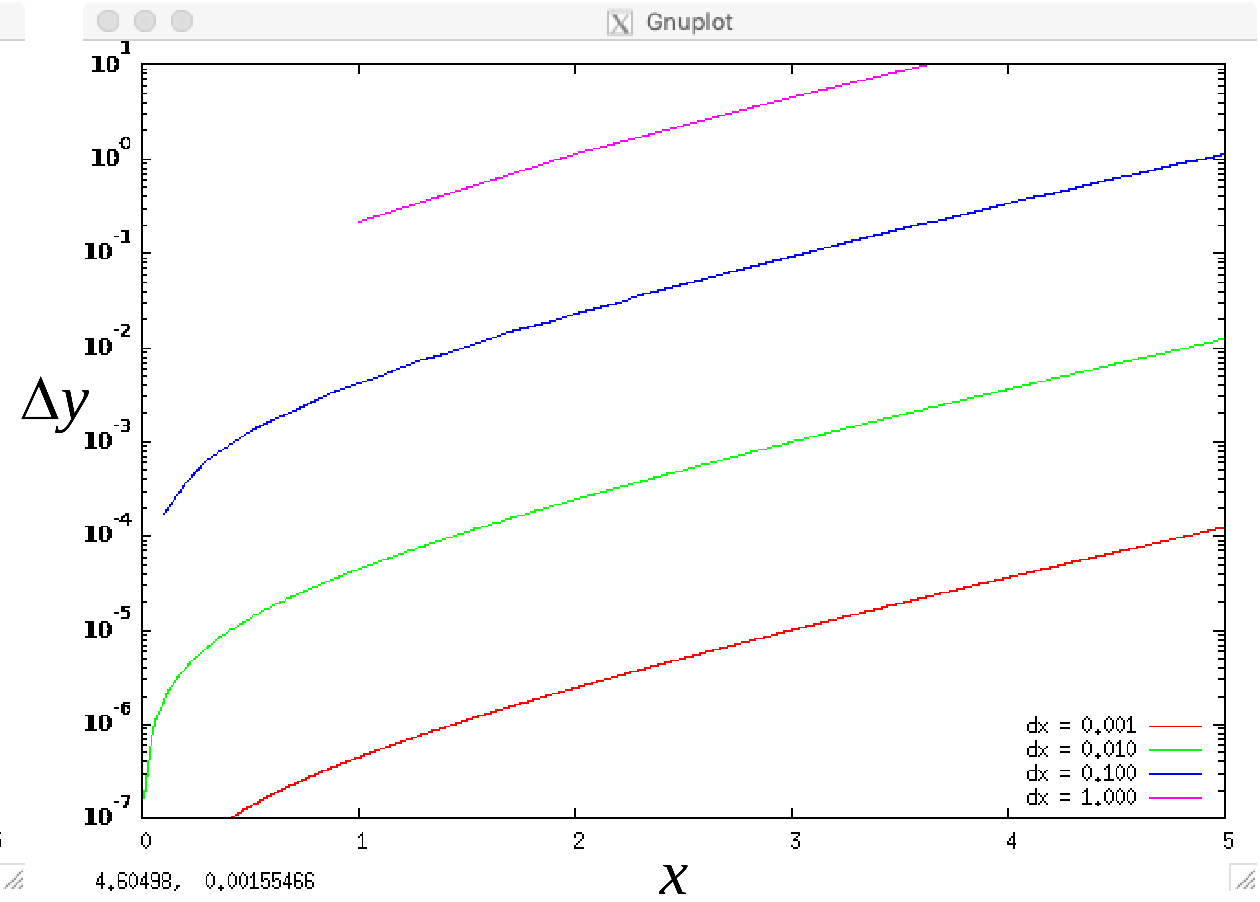
```
BEGIN{
 #dx   =  0.10  # from the command line
  x0   =  0.0   # initial value
  y0   =  1.0   # initial value
  xmax = 10.0
  printf("%e %e %e\n", x0, y0, 0)
}

{
  x = x0
  y = y0
  while (x < xmax){
    yeu = y + fxy(x,y)*dx                        # Euler
    y  += dx * (fxy(x,y) + fxy(x+dx,yeu))/2    # Trapezoid
    x  += dx
    printf("%e %e %e\n", x, y, fabs(y-yas(x)))
  }
}
```

(オイラー法) 精度の向上

$y = e^x$ との比較

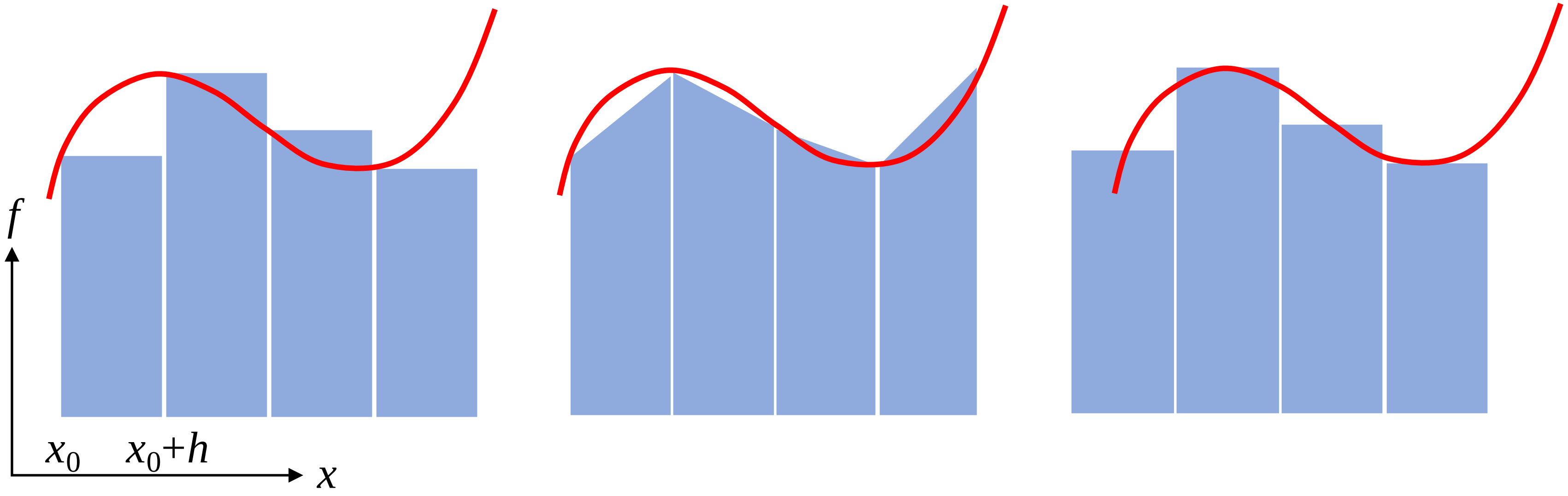


$y = e^x$ との差分



(オイラー法) 精度の向上

- 方法は他にもある
- 一般論もある



- 誤差をもっと小さくしたい → 高次化

ルンゲ・クッタ(4次)

- 4段

$$
\begin{aligned}
k_1 &= f\left(x_0, y(x_0)\right), \\
k_2 &= f\left(x_0 + \frac{h}{2}, y(x_0) + h\frac{k_1}{2}\right), \\
k_3 &= f\left(x_0 + \frac{h}{2}, y(x_0) + h\frac{k_2}{2}\right), \\
k_4 &= f\left(x_0 + h, y(x_0) + hk_3\right),
\end{aligned}
$$

$$
y(x_0 + h) = y(x_0) + \frac{h}{6}\left(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4\right)
$$

- 4次の精度 $O(h^4)$
- 段数 = step

一般化の例

$$d_0 = hf\left(x_0, y(x_0)\right),$$

$$d_1 = hf\left(x_0 + \alpha_1 h, y(x_0) + \beta_{10} d_0\right),$$

$$d_2 = hf\left(x_0 + \alpha_2 h, y(x_0) + \beta_{20} d_0 + \beta_{21} d_1\right),$$

$$d_3 = hf\left(x_0 + \alpha_3 h, y(x_0) + \beta_{30} d_0 + \beta_{31} d_1 + \beta_{32} d_2\right),$$

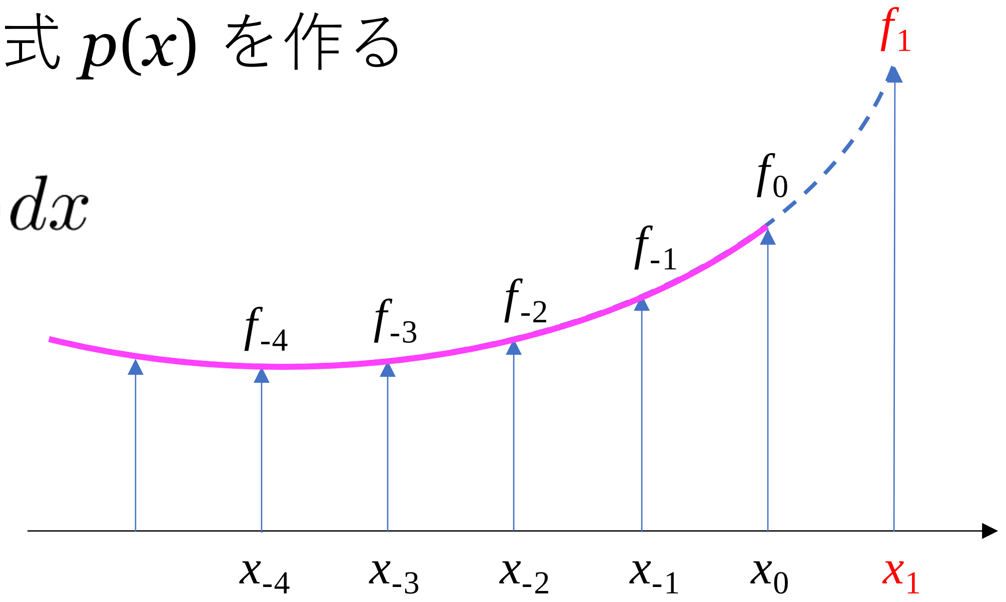
$$y(x_0 + h) = y(x_0) + \gamma_0 d_0 + \gamma_1 d_1 + \gamma_2 d_2 + \gamma_3 d_3$$

- これを $y\,(x_0{+}h)$ のテイラー展開と比較する
- $h^{要求次数}$ まで一致するように $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \beta_{10}$, □, γ_0, □, γ_3 を定める
    - 変数の数 > 方程式の数
    - 公式は唯一には決まらない

多段法（考え方のみ）

- m段(m回の関数 f 計算)が必要な理由
  - m次の多項式を作ってテイラー展開を近似する
- 過去に計算した結果を使えば良いのでは？
  - 例. $f_0, f_{-1}, f_{-2}, \ldots$ を使いm次の近似多項式 $p(x)$ を作る

$$y(x_0+h) = y(x_0) + \int_{x}^{x_0+h} p(x)dx$$



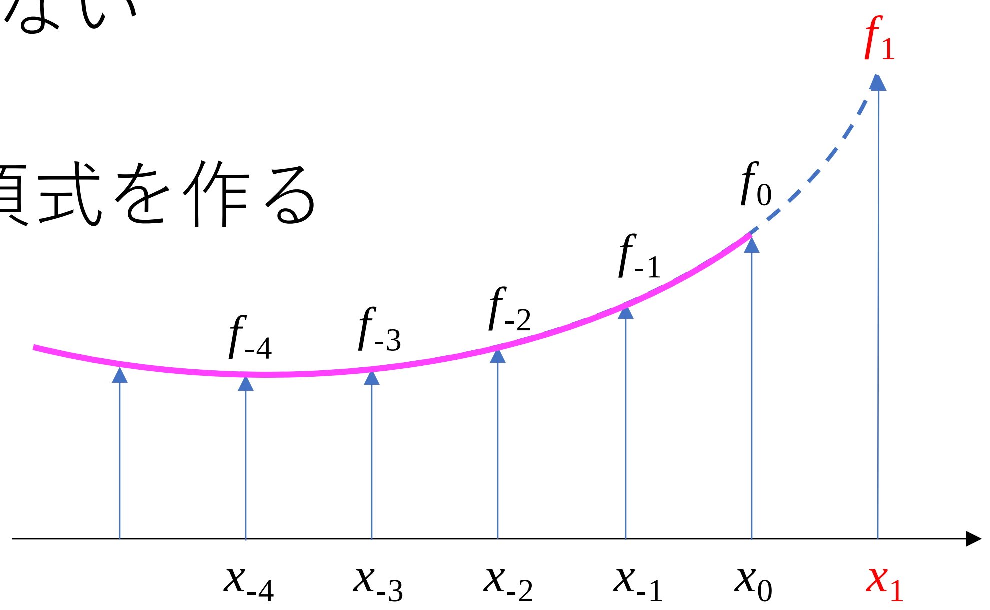
- 段数 = step

多段法（考え方のみ）

- 滑らかな関数であれば高い精度を得られる

- だが出発値を揃えるのが面倒
- 単なる外挿では安定した積分ができない
  - 例. Adams-Bashforth公式
- 対策: f_1, f_0 , f_{-1}, f_{-2}, ... を使い近似多項式を作る
  - 何らかの予測 → 補間 → 修正
  - 例. Adams-Moulton公式

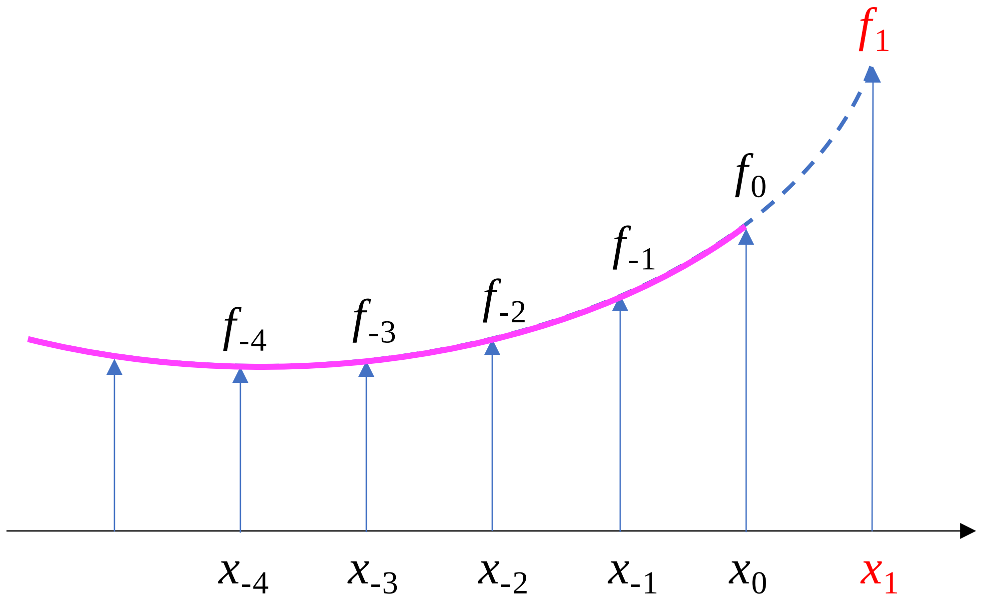
「予測子・修正子法」



やや仔細なので飛ばして良い

多段法（考え方のみ）

- それでも出発値の準備の面倒さは不可避
- 過去の値ではなく高階の導関数を使って多項式近似する
  - 例. エルミート法 Makino (1991)など
  - 本学校の他講義を参照

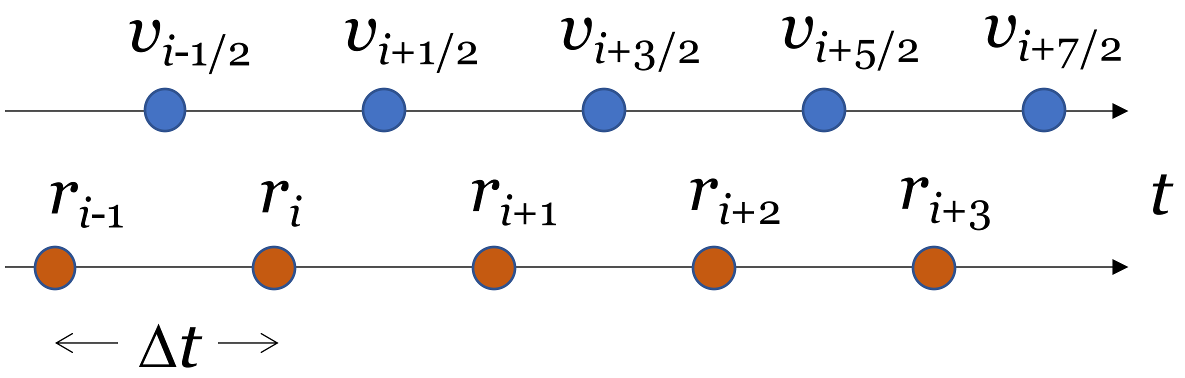


(本来の目的) 二階の常微分方程式

$$\frac{d^2\boldsymbol{r}}{dt^2} = F(\boldsymbol{r})\text{ , つまり }\quad \frac{d\boldsymbol{v}}{dt} = F(\boldsymbol{r}),\ \frac{d\boldsymbol{r}}{dt} = v$$

に関し、以下の方法は良い。

$$\begin{cases} \boldsymbol{v}_{i+\frac{1}{2}} = \boldsymbol{v}_{i-\frac{1}{2}} + F(\boldsymbol{r}_i)\Delta t, \\ \boldsymbol{r}_{i+1} = \boldsymbol{r}_i + \boldsymbol{v}_{i+\frac{1}{2}}\Delta t \end{cases}$$



- 様々な記法・名称あり
  - Leapfrog (LF), velocity Verlet法, Störmer法など
    - “The Newton–Störmer–Verlet–leapfrog法” (Hairer+, 2003)
- 本学校の実習でも使われる

後半の構成

ハミルトン形式の復習

演算子による記述

一次の方法

精度の向上 (高次化)

対称性・可逆性

数値計算例

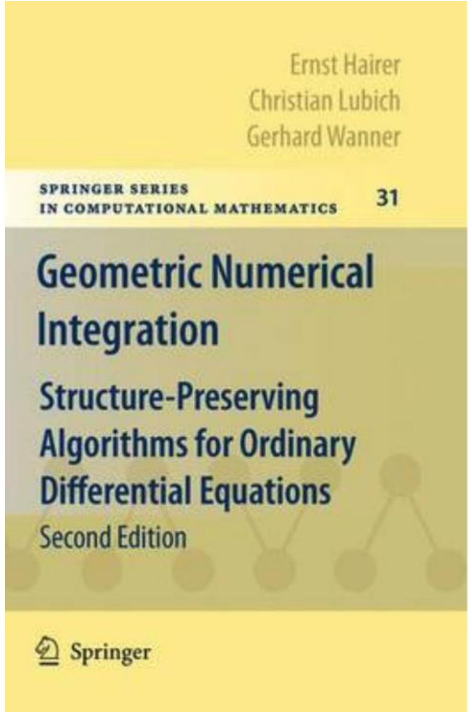
演算子の分割例

正準形式の解法

正準形式の解法

- 1990年代から急速に研究が盛んになった
  - 解析力学の理論体系に裏付けされており、天体力学と親和性が高い

- 多数の文献あり
- 日本人の貢献も大



復習

- (重力) $\boldsymbol{n}$ 体問題 → 多くはハミルトン形式で記述できる
- 一般化座標 $\boldsymbol{q}$, 一般化運動量 $\boldsymbol{p}$
- 正準運動方程式

$$\frac{dq_j}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_j}, \quad \frac{dp_j}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q_j} \quad (j = 1 \ldots n)$$

- ハミルトニアン

  $\boldsymbol{H}$ = 運動エネルギー($\boldsymbol{p}$) + ポテンシャルエネルギー($\boldsymbol{q}$)

復習

- 正準変換： 変数変換 $(q, p) \to (Q, P)$ 後も正準形式に書けること

$$\frac{dQ_j}{dt} = \frac{\partial \tilde{H}}{\partial P_j}, \quad \frac{dP_j}{dt} = -\frac{\partial \tilde{H}}{\partial Q_j} \quad (j = 1 \ldots n)$$

- ポアソン括弧 $\{,\}$

$$\{X, Y\}_{(\boldsymbol{q},\boldsymbol{p})} = \sum_{i=1}^{n} \left(\frac{\partial X}{\partial q_i}\frac{\partial Y}{\partial p_i} - \frac{\partial Y}{\partial q_i}\frac{\partial X}{\partial p_i} \right)$$

復習

- ハミルトン系の時間発展

$$\begin{pmatrix} \boldsymbol{q}(0) \\ \boldsymbol{p}(0) \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} \boldsymbol{q}(\tau) \\ \boldsymbol{p}(\tau) \end{pmatrix}$$

- これを座標変換と見做す → 正準変換になっている
  - ウェッジ積による表現 ($\Sigma\, \mathrm{d}q \wedge \mathrm{d}p$)
  - ポアソン括弧による表現
  - 行列による表現
  - ：
- この性質(構造)の保持を主目的とした数値解法がある

定義

- ポアソン括弧演算子 $\{\ ,K\}$

$$\{\ ,\ K\}\,F \equiv \{F,K\}$$

- $\{\ ,K\}$ の指数関数(指数演算子)

$$e^{\tau\{\ ,K\}} = \sum_{j=0}^{\infty}\frac{(\tau\,\{\ ,\ K\})^j}{j!}$$

$$= I + \frac{\tau\,\{\ ,\ K\}}{1!} + \frac{\tau^2\{\{\ ,\ K\}\,,K\}}{2!} + \frac{\tau^3\{\{\{\ ,\ K\}\,,K\},K\}}{3!}$$

$$+\cdots$$

$$\frac{dq_j}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_j}, \quad \frac{dp_j}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q_j}$$

形式的な解

- $z = q$ または p , ポアソン括弧 $\{,\}$ を使うと正準方程式は

$$\frac{dz}{dt} = \{z, H\}$$

- この右辺を以下と見做す（z に演算子 $\{,H\}$ を作用させる）

$$\frac{dz}{dt} = \{\ ,\ H\}\, z$$

- ここで $z(\tau)$ のテイラー展開を考える

$$\boxed{\frac{dq_j}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_j}, \quad \frac{dp_j}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q_j}}$$

形式的な解

- テイラー展開

$$z'(0) = \left.\frac{dz}{dt}\right|_{t=0}$$
$$z''(0) = \left.\frac{d^2z}{dt^2}\right|_{t=0}$$
$$z'''(0) = \left.\frac{d^3z}{dt^3}\right|_{t=0}$$
$$\vdots$$

$$z(\tau) = z(0) + z'(0)\tau + \frac{z''(0)}{2!}\tau^2 + \frac{z'''(0)}{3!}\tau^3 + \cdots$$
$$= z(0) + \tau\{\ ,H\}z(0) + \frac{\tau^2}{2!}\{\{\ ,H\},H\}z(0)$$
$$+ \frac{\tau^3}{3!}\{\{\{\ ,H\},H,\},H\}z(0) + \frac{\tau^4}{4!}\{\{\{\{\ ,H\},H,\},H\},H\}z(0) + \cdots$$
$$= \Bigg(\underbrace{I + \tau\{\ ,\ H\} + \frac{\tau^2\{\{\ ,\ H\}\ ,H\}}{2!} + \frac{\tau^3\{\{\{\ ,\ H\}\ ,H\},H\}}{3!} + \cdots}_{\text{指数演算子}e^{\tau\{,H\}}\text{の定義}}\Bigg) z(0)$$
$$= e^{\tau\{\ ,H\}}z(0)$$

形式的な解

- ハミルトニアンの分割（運動エネルギー$\boldsymbol{T}$, ポテンシャル$\boldsymbol{V}$）

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

- 形式的な解

$$\begin{aligned} z(\tau) &= e^{\tau\{\ ,H\}} z(0) \\ &= e^{\tau\{\ ,T+V\}} z(0) \\ &= e^{(\tau\{\ ,T\}+\tau\{\ ,V\})} z(0) \\ &= e^{\tau(A+B)} z(0) \end{aligned}$$

$$A \equiv \{\ ,T\}, \quad B \equiv \{\ ,V\}$$

$$A \equiv \{\ , T\}, \quad B \equiv \{\ , V\}$$

形式的な解

- 以下の操作(演算)では厳密な解が求まる

$$z(\tau) = e^{\tau A} z(0), \quad z(\tau) = e^{\tau B} z(0)$$

- $\boldsymbol{e^{\tau A}}$ を使った説明。$\boldsymbol{p}$ に演算を施すと

$$e^{\tau A} p = \left(I + \tau A + \frac{\tau^2}{2} A^2 + \cdots \right) p$$

$$= p + \tau \{p, T\} + \frac{\tau^2}{2} \{\{p, T\}, T\} + \cdots$$

$$= p + \tau \left(\frac{\partial p}{\partial q} \frac{\partial T}{\partial p} - \frac{\partial p}{\partial p} \frac{\partial T}{\partial q} \right) + \frac{\tau^2}{2} \left\{ \left(\frac{\partial p}{\partial q} \frac{\partial T}{\partial p} - \frac{\partial p}{\partial p} \frac{\partial T}{\partial q} \right), T \right\} + \cdots$$

$$= p$$

←$\boldsymbol{p}$ はこの演算により不変(定数)

$\boxed{A \equiv \{\ ,T\},\quad B \equiv \{\ ,V\}}$

形式的な解

- q に演算を施すと

$$
\begin{aligned}
e^{\tau A} q &= \left(I + \tau A + \frac{\tau^2}{2} A^2 + \cdots \right) q \\
&= q + \tau \{q, T\} + \frac{\tau^2}{2} \{\{q, T\}, T\} + \cdots \\
&= q + \tau \left(\frac{\partial q}{\partial q} \frac{\partial T}{\partial p} - \frac{\partial q}{\partial p} \frac{\partial T}{\partial q} \right) + \frac{\tau^2}{2} \left\{ \left(\frac{\partial q}{\partial q} \frac{\partial T}{\partial p} - \frac{\partial q}{\partial p} \frac{\partial T}{\partial q} \right), T \right\} + \cdots \\
&= q + \tau \frac{\partial T}{\partial p} + \frac{\tau^2}{2} \left\{ \frac{\partial T}{\partial p}, T(p) \right\} \\
&= q + \tau \frac{\partial T}{\partial p} + \frac{\tau^2}{2} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial q \partial p} \frac{\partial T}{\partial p} - \frac{\partial^2 T}{\partial p^2} \frac{\partial T}{\partial q} \right) \\
&= q + \tau \boxed{\frac{\partial T}{\partial p}}
\end{aligned}
$$

前頁より p は定数なのでこれも定数。つまり q は等速直線運動

$A \equiv \{\ , T\}, \quad B \equiv \{\ , V\}$

形式的な解

- $e^{\tau A}$ による演算のまとめ
  - $p \rightarrow$ 定数
  - q の変化量 $\propto \tau \rightarrow$ 等速直線運動
- $e^{\tau B}$ による演算も同様
  - $q \rightarrow$ 定数
  - p の変化量 $\propto \tau \rightarrow$ 等速直線運動
- これらの操作(演算)を組み合わせて近似解を得たい

形式的な解

- 真の時間発展 $e^{\tau(A+B)}$を展開

$$e^{\tau(A+B)} = 1 + \tau(A+B) + \frac{\tau^2}{2}(A+B)^2 + O(\tau^3)$$
$$= 1 + \tau(A+B) + \frac{\tau^2}{2}\left(A^2 + AB + BA + B^2\right) + O(\tau^3)$$

- 正確に計算できるのは

$$e^{\tau A}e^{\tau B} = \left(1 + \tau A + \frac{\tau^2}{2}A^2 + O(\tau^3)\right)\left(1 + \tau B + \frac{\tau^2}{2}B^2 + O(\tau^3)\right)$$
$$= 1 + \tau(A+B) + \frac{\tau^2}{2}\left(A^2 + 2AB + B^2\right) + O(\tau^3)$$

- $O(\tau)$まで合致

一次のスキーム

- $e^{\tau A}\, e^{\tau B}$ の演算結果を書き下すと

$$q(\tau) = q(0) + \tau\, \left.\frac{\partial T}{\partial p}\right|_{p(0)}$$

$$p(\tau) = p(0) - \tau\, \left.\frac{\partial V}{\partial q}\right|_{q(\tau)}$$

シンプレクティク数値解法
(一次)

一次のスキーム

- オイラー法で同様な計算をすると

$$q(\tau) = q(0) + \tau \left.\frac{\partial T}{\partial p}\right|_{p(0)}$$

$$p(\tau) = p(0) - \tau \left.\frac{\partial V}{\partial q}\right|_{q(0)}$$

調和振動子（オイラー法）

```
BEGIN{
 #dt =          0.10 # from the command line
  q   = q_pre = 1.0  # initial value
  p   = p_pre = 0.0  # initial value
  tmax      = 100.0
}
{
  t = 0
  while (t < tmax){
    t += dt
    q += dt*p_pre
    p -= dt*q_pre
    printf("%e %e %e\n", t, q, p)
    q_pre = q
    p_pre = p
  }
}
```

ハミルトニアン

$$H = \frac{1}{2}\left(q^2 + p^2\right)$$

運動方程式

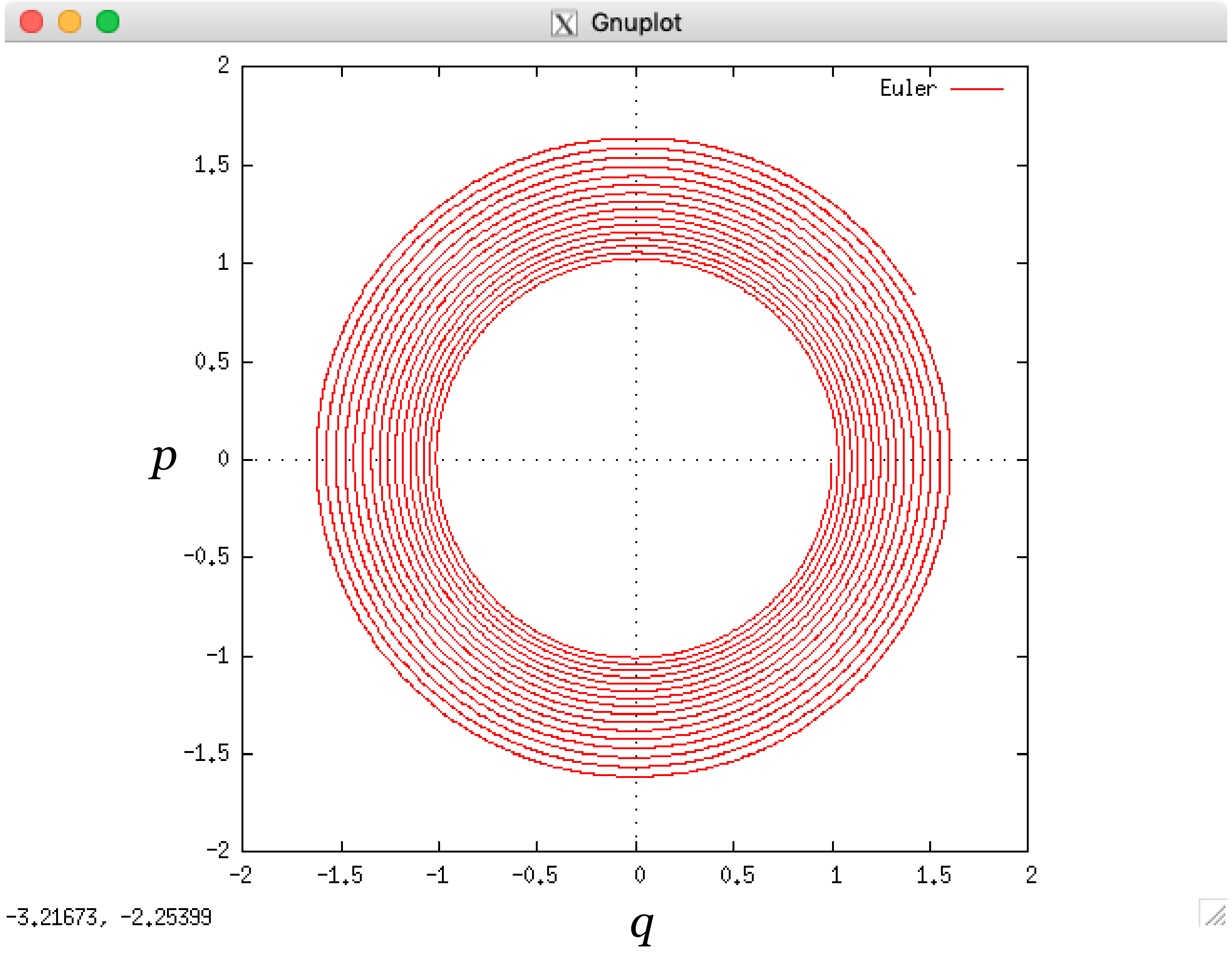
$$\frac{dq}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p} = p, \quad \frac{dp}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q} = -q$$

厳密解（位相空間内での回転）

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

調和振動子（オイラー法）

- 発散する



調和振動子（シンプレクティク数値解法）

```
BEGIN{
 #dt =         0.10 # from the command line
  q  =         1.0  # initial value
  p  =         0.0  # initial value
  tmax      = 100.0
}
{
  t = 0
  while (t < tmax){
    t += dt
    q += dt*p
    p -= dt*q
    printf("%e %e %e\n", t, q, p)
  }
}
```

ハミルトニアン

$$H = \frac{1}{2}\left(q^2 + p^2\right)$$

運動方程式

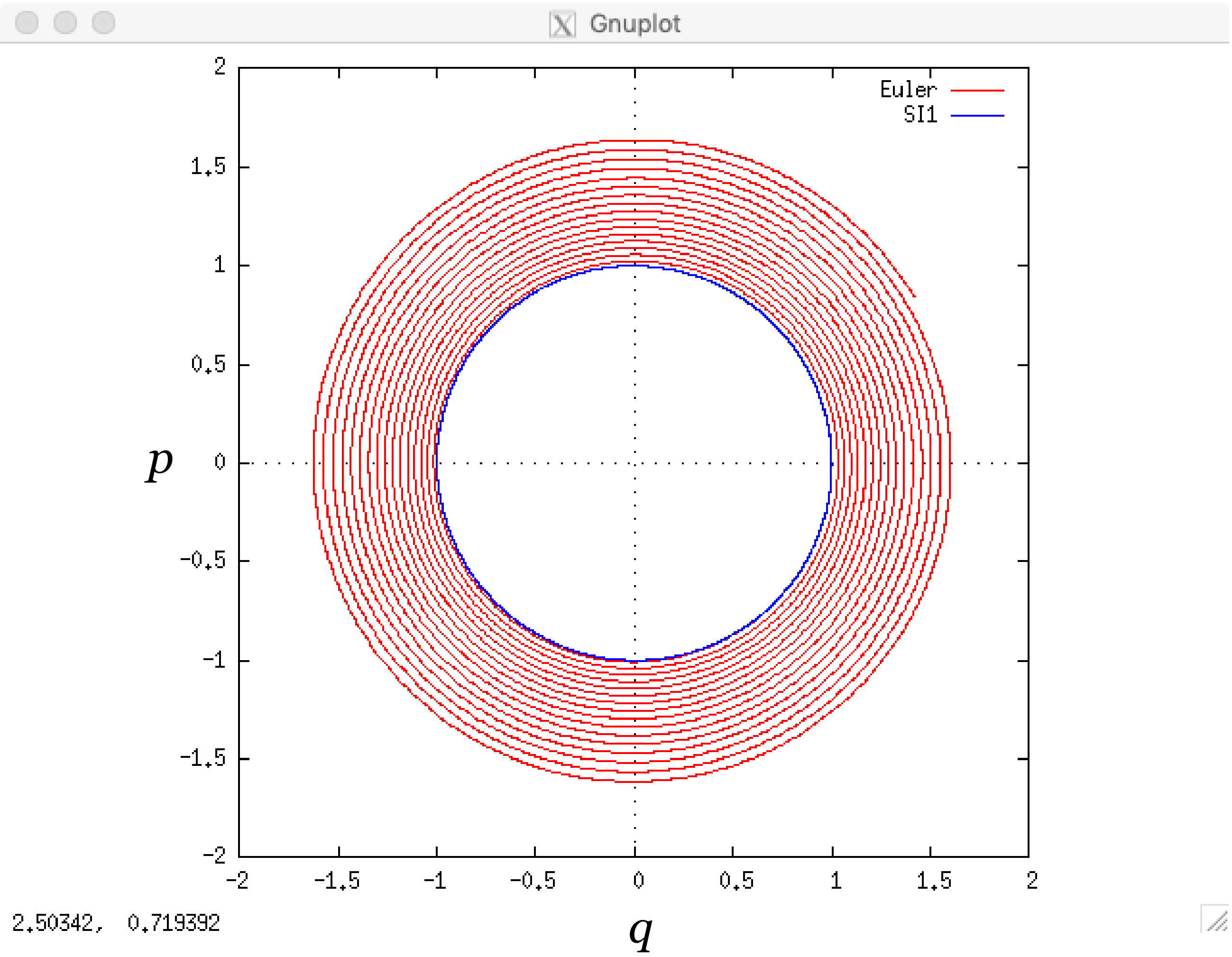
$$\frac{dq}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p} = p, \quad \frac{dp}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q} = -q$$

厳密解（位相空間内での回転）

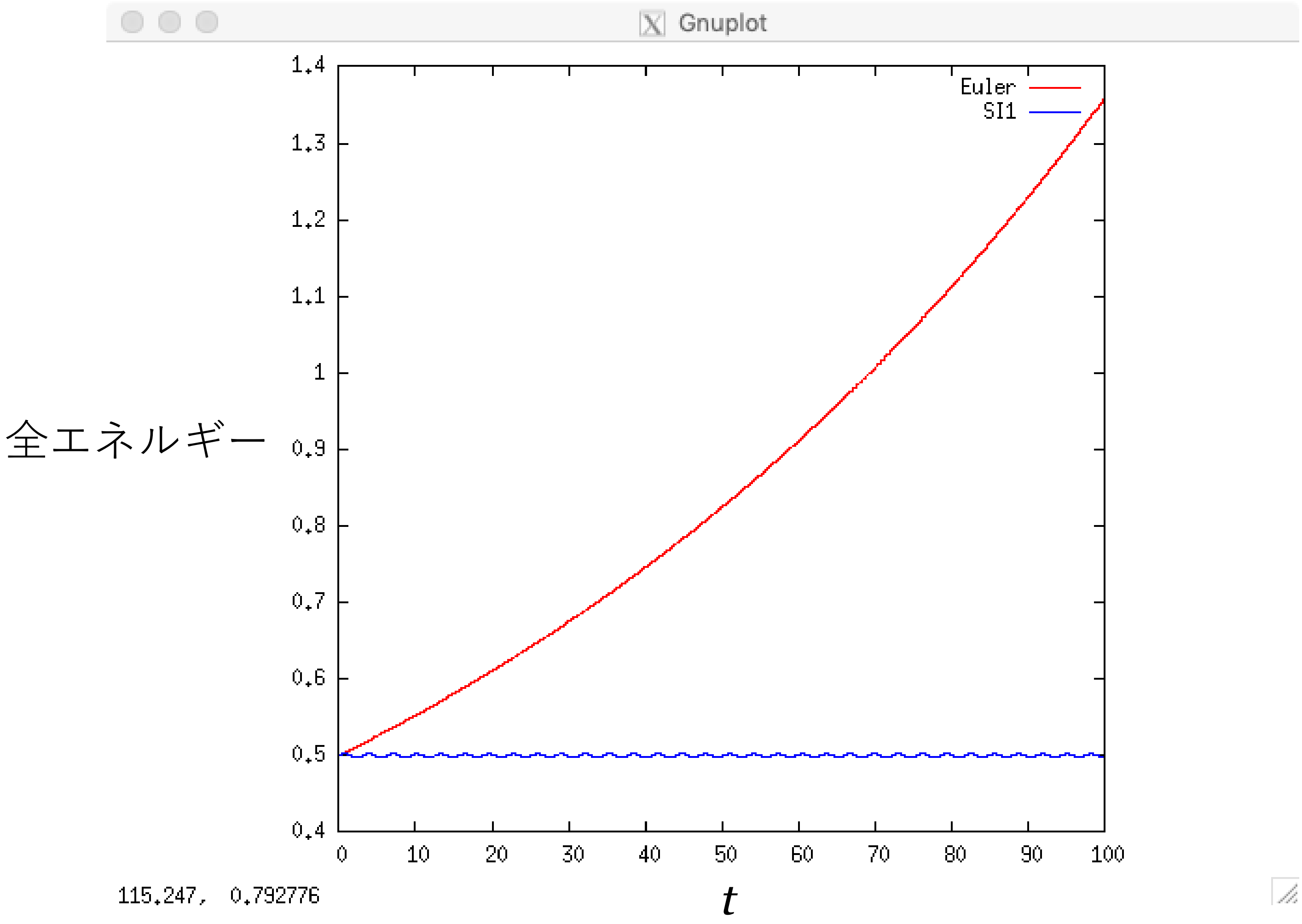
$$\begin{pmatrix} q(\tau) \\ p(\tau) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\tau & \sin\tau \\ -\sin\tau & \cos\tau \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q(0) \\ p(0) \end{pmatrix}$$

調和振動子（シンプレクティク数値解法）

- 発散しない



全エネルギーの保存状態



違いは少しだけ

オイラー法

```
while (t < tmax){
  q += dt*p_pre
  p -= dt*q_pre
}
```

シンプレクティク数値解法

```
while (t < tmax){
  q += dt*p
  p -= dt*q
}
```

この辺りの背景

- 計算スキーム(左辺)、それが支配する系(右辺)

$$e^{\tau\{\ ,T\}}e^{\tau\{\ ,V\}} = e^{\tau\{\ ,\tilde{H}\}}$$

- ハミルトニアン $\tilde{H}$ とは？

$$\tilde{H} = T + V + \frac{\tau}{2}\{V, T\}$$
$$+ \frac{\tau^2}{12}(\{\{T, V\}, V\} + \{\{V, T\}, T\}) + O(\tau^3)$$

誤差ハミルトニアン H_{error}

- 元々のハミルトニアンとの差異は $O(\tau)$ に留まる

やや仔細なので飛ばして良い

この辺りの背景

指数演算子の積

$$e^X e^Y = e^Z$$

Z は交換子 $[X,Y]$ だけで書ける

$$[X,Y] \equiv XY - YX$$

XとYが可換 → $[X, Y] = 0$

$$Z = X + Y$$

$$
\begin{aligned}
Z = X + Y + \frac{1}{2}[X,Y] \\
&+ \frac{1}{12}([X,[X,Y]] + [Y,[Y,X]]) - \frac{1}{24}[X,[Y,[X,Y]]] \\
&+ \frac{1}{120}([X,[Y,[X,[X,Y]]]] + [Y,[X,[Y,[Y,X]]]]) \\
&- \frac{1}{360}([Y,[X,[X,[X,Y]]]] + [X,[Y,[Y,[Y,X]]]]) \\
&- \frac{1}{720}([X,[X,[X,[X,Y]]]] + [Y,[Y,[Y,[Y,X]]]]) \\
&+ \frac{1}{1440}[X,[Y,[Y,[Y,[X,Y]]]]] - \frac{1}{720}[X,[X,[Y,[Y,[X,Y]]]]] \\
&+ \frac{1}{240}[X,[Y,[Y,[X,[X,Y]]]]] + \frac{1}{1440}[Y,[X,[X,[X,[X,Y]]]]] \\
&+ O([,[,[,[,[,[X,Y]]]]]])
\end{aligned}
$$

CBHD公式（以前はBCH公式とも）

Campbell, Baker, Hausdorff, and Dynkin

やや仔細なので飛ばして良い

この辺りの背景

- 便宜的に C を導入

$$e^{\tau A}e^{\tau B} = e^{\tau C}$$

- CBHD公式より

$$C = A + B + \frac{\tau}{2}[A, B] + O(\tau^2)$$
$$= A + B + \frac{\tau}{2}[\{\ ,T\},\{\ ,V\}] + O(\tau^2)$$
$$= A + B + \frac{\tau}{2}\{\ ,\{V,T\}\} + O(\tau^2)$$

- A, B, Cの定義より

$$\{\ ,\tilde{H}\} = \{\ ,T\} + \{\ ,V\} + \{\ ,\frac{\tau}{2}\{V,T\}\} + O(\tau^2)$$

- この演算子の線形性より

$$\tilde{H} = T + V + \frac{\tau}{2}\{V,T\} + O(\tau^2)$$

$A \equiv \{\ ,T\}$

$B \equiv \{\ ,V\}$

$C \equiv \{\ ,\tilde{H}\}$

τ で両辺を割ってある

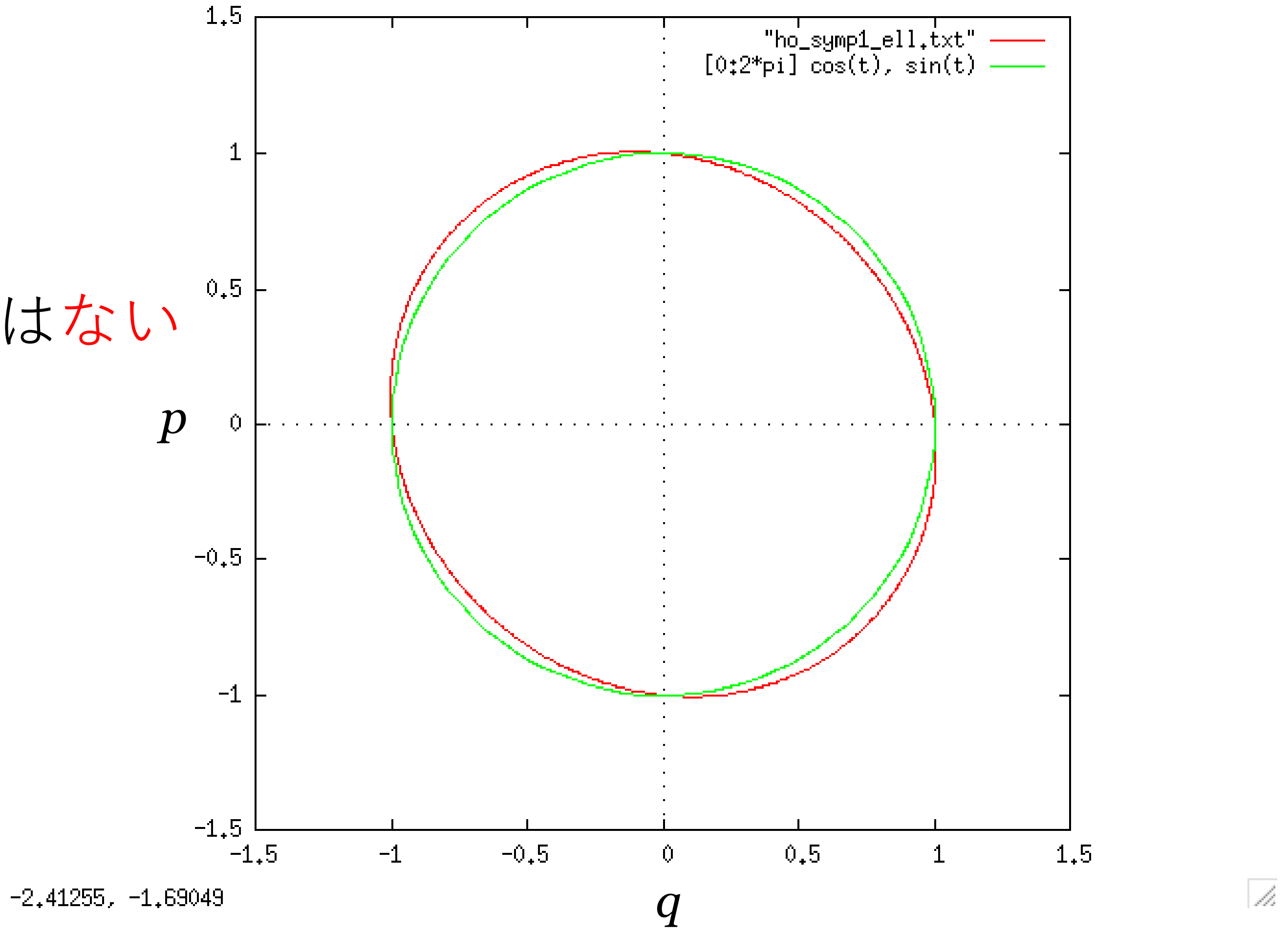
Jacobiの恒等式を使う

$$\{f,\{V,T\}\} + \{V,\{T,f\}\} + \{T,\{f,V\}\} = 0$$

高次の項も同様

この辺りの背景

【注】
保存量($\tilde{H}$)の存在がこの方法の
シンプレクティク性を示すのではない



(改めて) 正準変換の定義

- 何らかの変数変換

$$(q_1, q_2, \cdots, p_{n-1}, p_n) \to (Q_1, Q_2, \cdots, P_{n-1}, P_n)$$

- 変換のヤコビ行列

$$\boldsymbol{M} = \frac{\partial(Q_1, Q_2, \cdots, P_{n-1}, P_n)}{\partial(q_1, q_2, \cdots, p_{n-1}, p_n)}$$

- この変換が正準変換になる必要十分条件

$$\boldsymbol{M}\,\boldsymbol{J}\,\boldsymbol{M}^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{J}$$

但し $\boldsymbol{J} = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \boldsymbol{I} \\ -\boldsymbol{I} & \mathbf{0} \end{pmatrix}$

(シンプレクティク条件)

「演算がシンプレクティク」とは？

- 時間発展を表す演算子 Γ_τ

$$\boldsymbol{z}' = \Gamma_\tau \boldsymbol{z}$$

- Γ_τの作用を表すヤコビ行列

$$\boldsymbol{\Gamma}_\tau = \frac{\partial(z'_1, z'_2, \cdots, z'_{2n-1}, z'_{2n})}{\partial(z_1, z_2, \cdots, z_{2n-1}, z_{2n})} = \begin{pmatrix} \frac{\partial z'_1}{\partial z_1} & \frac{\partial z'_1}{\partial z_2} & \cdots & \frac{\partial z'_1}{\partial z_{2n}} \\ \frac{\partial z'_2}{\partial z_1} & \frac{\partial z'_2}{\partial z_2} & \cdots & \frac{\partial z'_2}{\partial z_{2n}} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial z'_{2n}}{\partial z_1} & \frac{\partial z'_{2n}}{\partial z_2} & \cdots & \frac{\partial z'_{2n}}{\partial z_{2n}} \end{pmatrix}$$

- 以下の関係が成立する ⇔
  Γ_τによる演算はシンプレクティク

$$\boldsymbol{\Gamma}_\tau \, \boldsymbol{J} \, \boldsymbol{\Gamma}_\tau^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{J}$$

$e^{\tau A}$ と $e^{\tau B}$ では

- $e^{\tau A}$ の作用： $q' = \Gamma_{\tau,A}\, q = q + \tau \left.\dfrac{\partial T}{\partial p}\right|_p$

$$\boldsymbol{\Gamma}_{\tau,A} = \frac{\partial(q',p)}{\partial(q,p)} = \begin{pmatrix} \frac{\partial q'}{\partial q} & \frac{\partial q'}{\partial p} \\ \frac{\partial p}{\partial q} & \frac{\partial p}{\partial p} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & \tau \frac{\partial^2 T}{\partial p^2} \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

- $e^{\tau B}$ の作用： $p' = \Gamma_{\tau,B}\, p = p - \tau \left.\dfrac{\partial V}{\partial q}\right|_{q'}$

$$\boldsymbol{\Gamma}_{\tau,B} = \frac{\partial(q',p')}{\partial(q',p)} = \begin{pmatrix} \frac{\partial q'}{\partial q'} & \frac{\partial q'}{\partial p} \\ \frac{\partial p'}{\partial q'} & \frac{\partial p'}{\partial p} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -\tau \frac{\partial^2 V}{\partial q'^2} & 1 \end{pmatrix}$$

$e^{\tau A}$ と $e^{\tau B}$ では

積行列

$$\boldsymbol{\Gamma}_{\tau,B}\boldsymbol{\Gamma}_{\tau,A} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -\tau\frac{\partial^2 V}{\partial q'^2} & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & \tau\frac{\partial^2 T}{\partial p^2} \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & \tau\frac{\partial^2 T}{\partial p^2} \\ -\tau\frac{\partial^2 V}{\partial q'^2} & 1-\tau^2\frac{\partial^2 T}{\partial p^2}\frac{\partial^2 V}{\partial q'^2} \end{pmatrix}$$

転置

$$\left(\boldsymbol{\Gamma}_{\tau,B}\boldsymbol{\Gamma}_{\tau,A}\right)^{\mathrm{T}} = \begin{pmatrix} 1 & -\tau\frac{\partial^2 V}{\partial q'^2} \\ \tau\frac{\partial^2 T}{\partial p^2} & 1-\tau^2\frac{\partial^2 T}{\partial p^2}\frac{\partial^2 V}{\partial q'^2} \end{pmatrix}$$

シンプレクティク条件？

$$\begin{aligned}
&\left(\boldsymbol{\Gamma}_{\tau,B}\boldsymbol{\Gamma}_{\tau,A}\right)\boldsymbol{J}\left(\boldsymbol{\Gamma}_{\tau,B}\boldsymbol{\Gamma}_{\tau,A}\right)^{\mathrm{T}} \\
&= \begin{pmatrix} 1 & \tau\frac{\partial^2 T}{\partial p^2} \\ -\tau\frac{\partial^2 V}{\partial q'^2} & 1-\tau^2\frac{\partial^2 T}{\partial p^2}\frac{\partial^2 V}{\partial q'^2} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & -\tau\frac{\partial^2 V}{\partial q'^2} \\ \tau\frac{\partial^2 T}{\partial p^2} & 1-\tau^2\frac{\partial^2 T}{\partial p^2}\frac{\partial^2 V}{\partial q'^2} \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \\
&= \boldsymbol{J}
\end{aligned}$$

(話を戻して) 精度の向上

- 高次スキームの一般形

$$e^{\tau(A+B)} = e^{c_1\tau A}e^{d_1\tau B} \times \cdots \times e^{c_k\tau A}e^{d_k\tau B} + O\left(\tau^{n+1}\right)$$

- 以下の各々を代入

$$e^{\tau(A+B)} = 1 + \frac{\tau(A+B)}{1!} + \frac{\tau^2(A+B)^2}{2!} + \frac{\tau^3(A+B)^3}{3!} + \cdots \quad \to \text{左辺へ}$$

$$e^{\tau A} = 1 + \frac{\tau A}{1!} + \frac{\tau^2 A^2}{2!} + \frac{\tau^3 A^3}{3!} + \cdots, \quad e^{\tau B} = 1 + \frac{\tau B}{1!} + \frac{\tau^2 B^2}{2!} + \frac{\tau^3 B^3}{3!} + \cdots \quad \to \text{右辺へ}$$

- A, B, A^2, AB, BA, B^2, …の係数を比較し、未知数 c_1, c_2, …, d_1, d_2, … ($と k$)を定める

係数の計算例（一次）

```
# [A,B] != [B,A]
with(Physics):
Setup(noncommutativeprefix = {A, B}):

# exp(x) up to x^1
expx := x -> 1 + x;

# the authentic operator (1st)
expx := x -> 1 + x;

# the authentic operator (1st)
opeauth := expand(expx(t*(A+B)));

# si operator (1st)
opesim1 := convert(expand( expx(c1*t*(A))*expx(d1*t*(B)) ),polynom);


# sort and truncate up to t^2
sort(mtaylor(combine(opeauth), [t], 2), t, ascending);
sort(mtaylor(combine(opesim1), [t], 2), t, ascending);
```

係数の計算例（一次）

```
    |\^/|     Maple 2018 (X86 64 LINUX)
._|\|   |/|_. Copyright (c) Maplesoft, a division of Waterloo Maple Inc. 2018
 \  MAPLE  /  All rights reserved. Maple is a trademark of
 <____ ____>  Waterloo Maple Inc.
      |       Type ? for help.

> expx := x -> 1 + x;
                               expx := x -> x + 1
> opeauth := expand(expx(t*(A+B)));
                            opeauth := A t + B t + 1
> opesim1 := convert(expand(expx(c1*t*(A))*expx(d1*t*(B))  ),polynom);
                               2
                 opesim1 := c1 t  d1 (A B) + c1 t A + d1 t B + 1
> sort(mtaylor(combine(opeauth),  [t], 2), t, ascending);
                                 1 + (A + B) t
> sort(mtaylor(combine(opesim1),  [t], 2), t, ascending);
                              1 + (A c1 + B d1) t
```

係数の計算例（一次）

$c_1 = 1$

$d_1 = 1$

$(k = 1)$

係数の計算例（二次）

```
# [A,B] != [B,A]
with(Physics):
Setup(noncommutativeprefix = {A, B}):

# exp(x) up to x^2
expx := x -> 1 + x + (x^2)/2!;

# the authentic operator (2nd)
opeauth := expand(expx(t*(A+B)));

# si operator (2nd)
opesim2 := convert(expand( expx(c1*t*(A))*expx(d1*t*(B))
                          *expx(c2*t*(A))*expx(d2*t*(B)) ),polynom);

# sort and truncate up to t^2
sort(mtaylor(combine(opeauth), [t], 3), t, ascending);
sort(mtaylor(combine(opesim2), [t], 3), t, ascending);
```

係数の計算例（二次）

```
> expx := x -> 1 + x + (x^2)/2!;
  expx := x -> 1 + x + Physics:-`*`(Physics:-`^`(x, 2), Physics:-`^`(2!, -1))
> opeauth := expand(expx(t*(A+B)));
                                2                2               2                2
opeauth := 1 + t A + t B + 1/2 t  ^(A, 2) + 1/2 t  (A B) + 1/2 t  (B A)  + 1/2 t  ^(B, 2)
(中略)
> sort(mtaylor(combine(opeauth), [t], 3), t, ascending);
                                                                        2
             1 + (A + B) t + 1/2 (^(A, 2) + A B + B A + ^(B, 2)) t
> sort(mtaylor(combine(opesim2), [t], 3), t, ascending);
                                                  2
1 + (A c1 + A c2 + B d1 + B d2) t + 1/2 (c1  ^(A, 2) + 2 c2 c1 ^(A, 2)
         2                     2                                2
     + c2  ^(A, 2) + ^(B, 2) d1  + 2 ^(B, 2) d2 d1 + ^(B, 2) d2
                                                                        2
     + 2 d1 c2 (B A) + 2 c1 d1 (A B) + 2 c1 d2 (A B) + 2 c2 d2 (A B)) t
```

係数の計算例（二次）

$c_1 = ½$

$d_1 = 1$

$c_2 = ½$

$d_2 = 0$

$(k = 2)$

二次の方法

形式的に書けば

$$e^{\tau(A+B)} = e^{\frac{\tau}{2}A} e^{\tau B} e^{\frac{\tau}{2}A} + O\left(\tau^3\right)$$

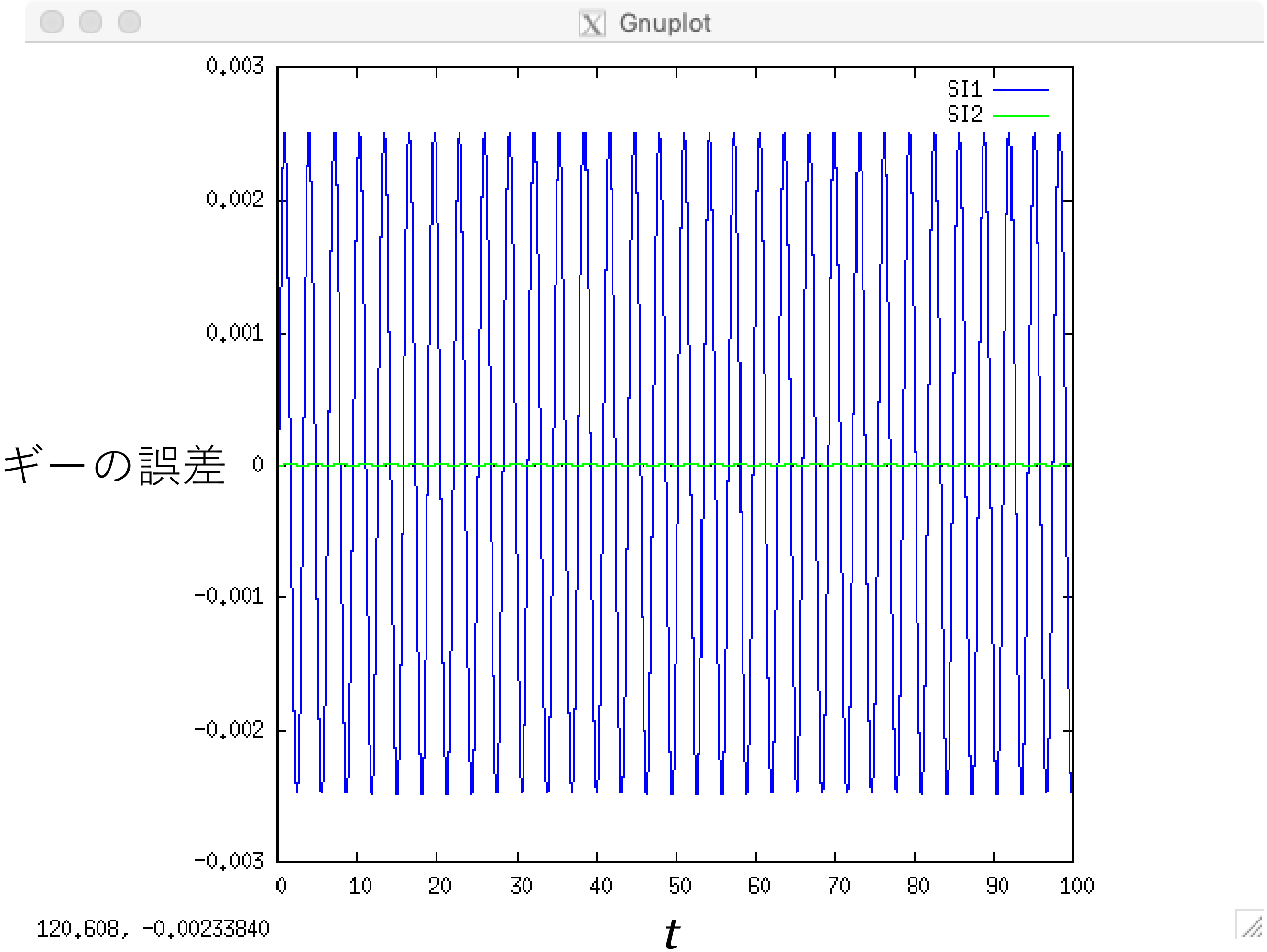
実際的な書き方

$$\left.\begin{aligned} q^* &= q(0) + \frac{\tau}{2} \left.\frac{\partial T}{\partial p}\right|_{p(0)} \\ p(\tau) &= p(0) - \tau \left.\frac{\partial V}{\partial q}\right|_{q^*} \\ q(\tau) &= q^* + \frac{\tau}{2} \left.\frac{\partial T}{\partial p}\right|_{p(\tau)} \end{aligned}\right\} \text{Leapfrogと等価}$$

二次の方法（または Leapfrog）

```
BEGIN{
 #dt =          0.10 # from the command line
  q  =          1.0  # initial value
  p  =          0.0  # initial value
  tmax      = 100.0
}
{
  t = 0
  while (t < tmax){
    t += dt
    qd = q  + dt*p/2
    p  = p  - dt*qd
    q  = qd + dt*p/2
    printf("%e %e %e\n", t, q, p)
  }
}
```

二次の方法（または Leapfrog）



全エネルギーの誤差

t

一次
二次 (Leapfrog)

二次の方法（または Leapfrog）

- 計算スキーム(左辺)、それが支配する系(右辺)

$$e^{\frac{\tau}{2}\{\ ,T\}}e^{\tau\{\ ,V\}}e^{\frac{\tau}{2}\{\ ,T\}} = e^{\tau\left\{\ ,\tilde{H}\right\}}$$

- ハミルトニアン $\tilde{H}$

$$\tilde{H} = T + V$$
$$+ \frac{\tau^2}{24}\left(2\{\{T,V\},V\} - \{\{V,T\},T\}\right) + O(\tau^4)$$

- 元々のハミルトニアンとの差異は $O(\tau^2)$ に留まる

連続演算時の注意点

- 二次スキームの連続演算の形は以下

$$e^{\frac{\tau}{2}A}e^{\tau B}e^{\frac{\tau}{2}A}e^{\frac{\tau}{2}A}e^{\tau B}e^{\frac{\tau}{2}A}\cdots e^{\frac{\tau}{2}A}e^{\tau B}e^{\frac{\tau}{2}A}z(0)$$

- $e^{\tau A/2}\, e^{\tau A/2} = e^{\tau A}$ より、以下の形も可能

$$e^{\frac{\tau}{2}A}e^{\tau B}e^{\tau A}e^{\tau B}e^{\tau A}e^{\tau B}\cdots e^{\tau A}e^{\tau B}e^{\frac{\tau}{2}A}z(0)$$

- だが、結果の出力は $e^{\tau A/2}$ と $e^{\tau A/2}$ の間で行う必要あり

$$\cdots e^{\tau B}e^{\tau A}e^{\tau B}e^{\frac{\tau}{2}A} \Big| e^{\frac{\tau}{2}A}e^{\tau B}\cdots e^{\tau A}e^{\tau B}e^{\frac{\tau}{2}A} \Big| e^{\frac{\tau}{2}A}e^{\tau B}e^{\tau A}\cdots$$

出力　　出力

三次の方法

形式的に書けば

$$e^{\tau(A+B)} = e^{d_3\tau A}e^{c_3\tau B}e^{d_2\tau A}e^{c_2\tau B}e^{d_1\tau A}e^{c_1\tau B} + O\left(\tau^4\right)$$

係数

$$c_1 = \frac{7}{24},\ \ d_1 = \frac{2}{3},\ \ c_2 = \frac{3}{4},\ \ d_2 = -\frac{2}{3},\ \ c_3 = -\frac{1}{24},\ \ d_3 = 1$$

Ruth (1983)

実際的な書き方

$$p_1 = p(0) - c_1\tau \left.\frac{\partial V}{\partial q}\right|_{q(0)}, \qquad q_1 = q(0) + d_1\tau \left.\frac{\partial T}{\partial p}\right|_{p_1},$$

$$p_2 = p_1 - c_2\tau \left.\frac{\partial V}{\partial q}\right|_{q_1}, \qquad q_2 = q_1 + d_2\tau \left.\frac{\partial T}{\partial p}\right|_{p_2},$$

$$p(\tau) = p_2 - c_3\tau \left.\frac{\partial V}{\partial q}\right|_{q_2}, \qquad q(\tau) = q_2 + d_3\tau \left.\frac{\partial T}{\partial p}\right|_{p(\tau)}$$

四次の方法

- 形式展開

$$e^{\tau(A+B)} = e^{c_1\tau A}e^{d_1\tau B}e^{c_2\tau A}e^{d_2\tau B}e^{c_3\tau A}e^{d_3\tau B}e^{c_4\tau A}e^{d_4\tau B} + O\left(\tau^5\right)$$

- 係数セットの例

$$c_1 = c_4 = \frac{1}{2\left(2-2^{\frac{1}{3}}\right)}, \quad c_2 = c_3 = \frac{1-2^{\frac{1}{3}}}{2\left(2-2^{\frac{1}{3}}\right)}$$

$$d_1 = d_3 = \frac{1}{2-2^{\frac{1}{3}}}, \quad d_2 = \frac{-2^{\frac{1}{3}}}{2-2^{\frac{1}{3}}}, \quad d_4 = 0$$

より高次の方法 (偶数次)

6 次スキームの係数例	
w_3	$0.784513610477560 \times 10^0$
w_2	$0.235573213359357 \times 10^0$
w_1	$-0.117767998417887 \times 10^1$
w_0	$1-2(w_1+w_2+w_3)$

8 次スキームの係数例	
w_7	$0.104242620869991 \times 10^1$
w_6	$0.182020630970714 \times 10^1$
w_5	$0.157739928123617 \times 10^0$
w_4	$0.244002732616735 \times 10^1$
w_3	$-0.716989419708120 \times 10^{-2}$
w_2	$-0.244699182370524 \times 10^1$
w_1	$-0.161582374150097 \times 10^1$
w_0	$1-2(w_1+w_2+\cdots+w_7)$

- 二次の方法 S_2 を合成して構成可能 Yoshida (1990)

$$S_2(\tau) = e^{\frac{\tau}{2}\{\ ,T\}} e^{\tau\{\ ,V\}} e^{\frac{\tau}{2}\{\ ,T\}}$$

- 一般形

$$S^m(\tau) = S_2(w_m\tau)S_2(w_{m-1}\tau)\cdots S_2(w_1\tau)S_2(w_0\tau)S_2(w_1\tau)\cdots S_2(w_{m-1}\tau)S_2(w_m\tau)$$

- 六次 ($m = 3$で足りる)

$$S_6(\tau) = S_2(w_3\tau)S_2(w_2\tau)S_2(w_1\tau)S_2(w_0\tau)S_2(w_1\tau)S_2(w_2\tau)S_2(w_3\tau)$$

- 八次 ($m = 7$が必要)

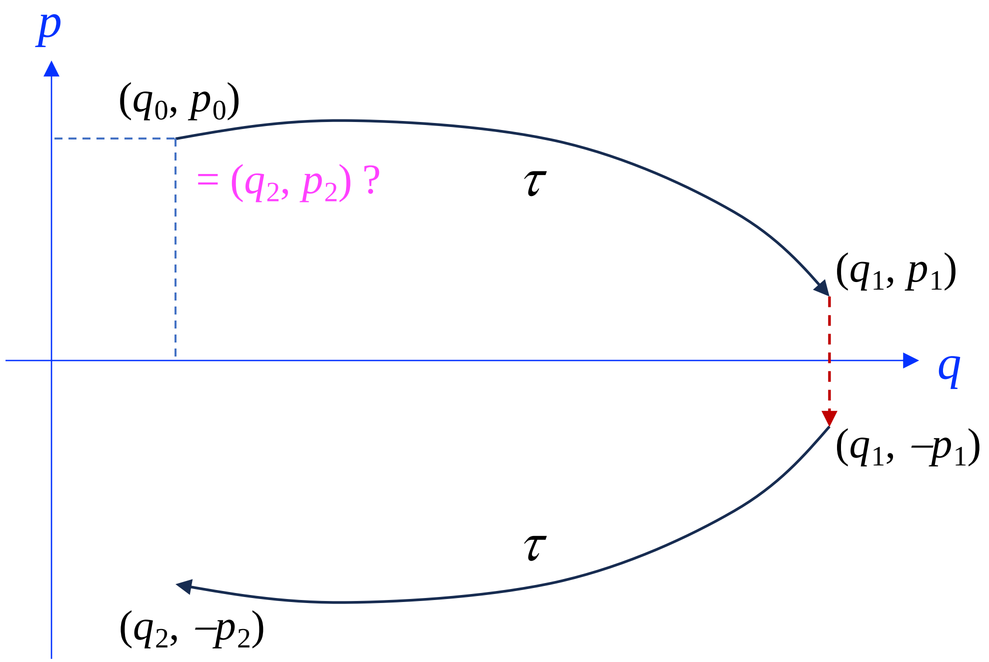
$$S_8(\tau) = S_2(w_7\tau)S_2(w_6\tau)S_2(w_5\tau)S_2(w_4\tau)S_2(w_3\tau)S_2(w_2\tau)S_2(w_1\tau)S_2(w_0\tau)$$
$$\cdot S_2(w_1\tau)S_2(w_2\tau)S_2(w_3\tau)S_2(w_4\tau)S_2(w_5\tau)S_2(w_6\tau)S_2(w_7\tau)$$

正規性、対称性、可逆性

本編に対する補足

可逆 (time-reversible)

- $(q_0, p_0) \rightarrow \tau \rightarrow (q_1, p_1)$
  - ➢ ここで p を反転
- $(q_1, -p_1) \rightarrow \tau \rightarrow (q_2, -p_2)$
  - ➢ もう一度 p を反転
- $(q_2, p_2) = (q_0, p_0)$ なら、可逆
  - ➢ (時間反転に関して)



- 重力N体系は時間反転に関して可逆 ⟹ 数値積分スキームにもこの構造を保たせたい

$$\frac{d\boldsymbol{p}}{dt} = -\nabla V(\boldsymbol{q})$$

可逆 (time-reversible)

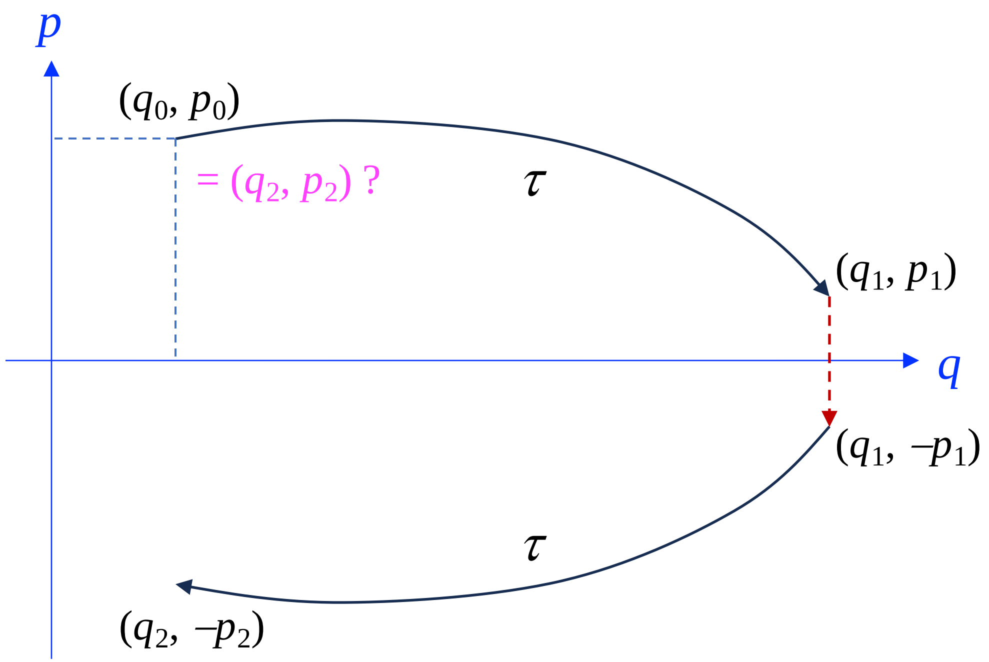
- 軌道伝播を表す演算子 G

$$G_\tau\,\boldsymbol{q} = \boldsymbol{q}', \quad G_\tau\,\boldsymbol{p} = \boldsymbol{p}'$$

- 時間反転を表す演算子 T

$$\mathcal{T}\,\boldsymbol{q} = \boldsymbol{q}, \quad \mathcal{T}\,\boldsymbol{p} = -\boldsymbol{p}$$

または $\mathcal{T}\begin{pmatrix}\boldsymbol{q}\\ \boldsymbol{p}\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\boldsymbol{I} & 0\\ 0 & -\boldsymbol{I}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\boldsymbol{q}\\ \boldsymbol{p}\end{pmatrix}$



- 力学系が時間反転に関して可逆である ↔

$$G_\tau\,\mathcal{T}\,G_\tau = \mathcal{T}$$

やや仔細なので飛ばして良い

正規 (normal)

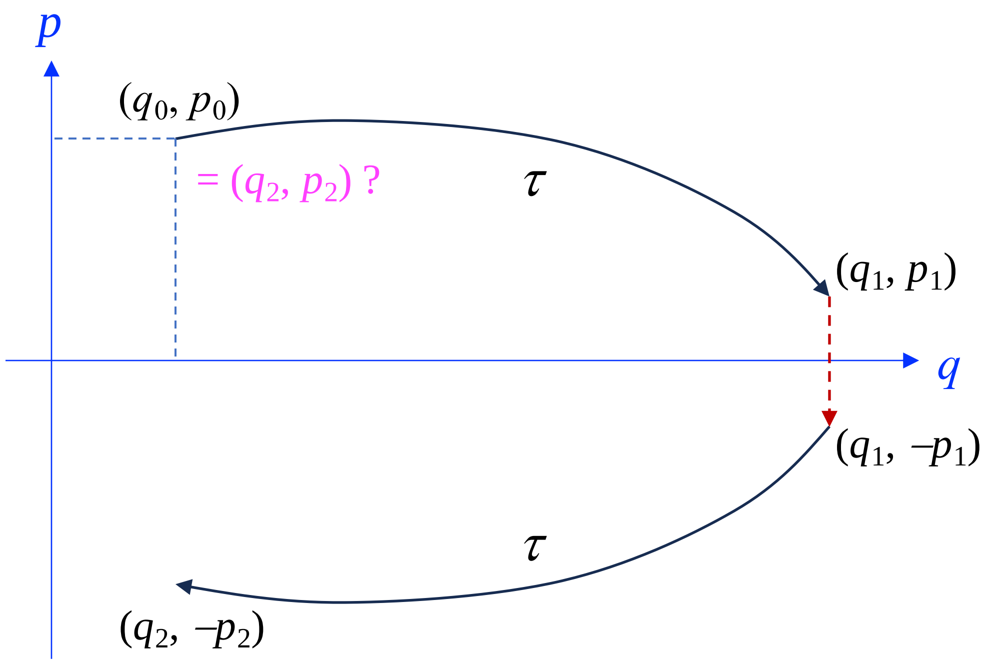
- 積分法が正規である↔

$$\mathcal{T}\,\Gamma_\tau = \Gamma_{-\tau}\mathcal{T}$$

または

$$\Gamma_{-\tau}^{-1}\,\mathcal{T}\,\Gamma_\tau = \mathcal{T}$$

- $\Gamma_{\tau,A}$ と $\Gamma_{\tau,B}$



$$\left[\begin{aligned} \mathcal{T}\Gamma_{\tau,A}\begin{pmatrix} q_0 \\ p_0 \end{pmatrix} &= \mathcal{T}\begin{pmatrix} q' \\ p_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} q' \\ -p_0 \end{pmatrix} \\ \Gamma_{-\tau,A}\mathcal{T}\begin{pmatrix} q_0 \\ p_0 \end{pmatrix} &= \Gamma_{-\tau,A}\begin{pmatrix} q_0 \\ -p_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} q' \\ -p_0 \end{pmatrix} \end{aligned}\right.$$

$$\left[\begin{aligned} \mathcal{T}\Gamma_{\tau,B}\begin{pmatrix} q' \\ p_0 \end{pmatrix} &= \mathcal{T}\begin{pmatrix} q' \\ p' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} q' \\ -p' \end{pmatrix} \\ \Gamma_{-\tau,B}\mathcal{T}\begin{pmatrix} q' \\ p_0 \end{pmatrix} &= \Gamma_{-\tau,B}\begin{pmatrix} q' \\ -p_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} q' \\ -p' \end{pmatrix} \end{aligned}\right.$$

正規 (normal)

- $\Gamma_{\tau,A}$と$\Gamma_{\tau,B}$はいずれも正規

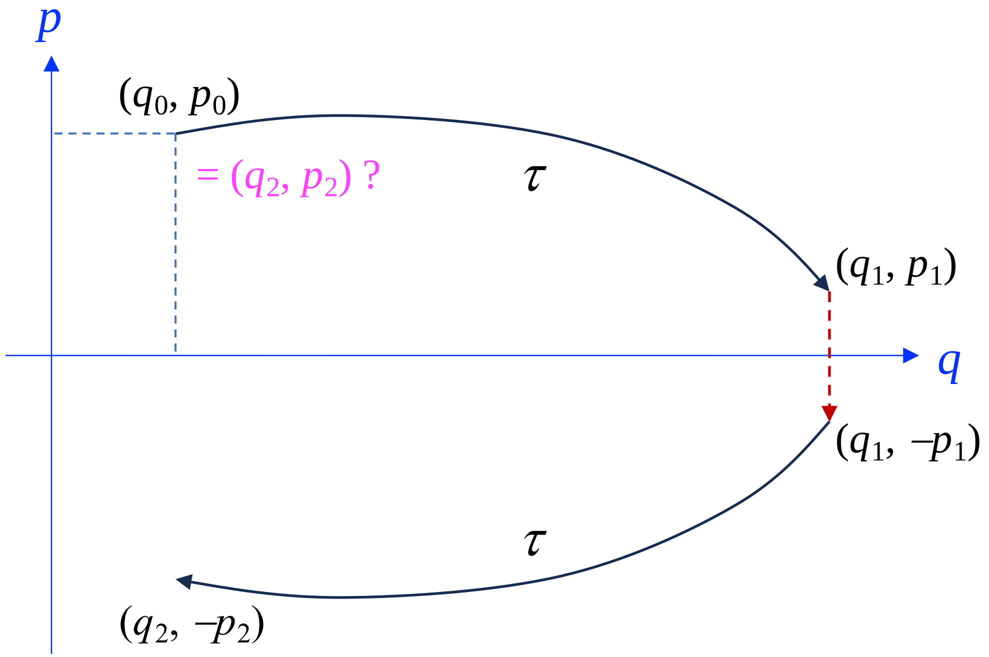
$$\mathcal{T}\,\Gamma_{\tau,A} = \Gamma_{-\tau,A}\,\mathcal{T}$$

$$\mathcal{T}\,\Gamma_{\tau,B} = \Gamma_{-\tau,B}\,\mathcal{T}$$

- この時、演算子$\Gamma_{\tau,A}\,\Gamma_{\tau,B}$も正規

$$\mathcal{T}\,\Gamma_{\tau,A}\,\Gamma_{\tau,B} = \Gamma_{-\tau,A}\,\mathcal{T}\,\Gamma_{\tau,B}$$

$$= \Gamma_{-\tau,A}\,\Gamma_{-\tau,B}\,\mathcal{T}$$



対称 (symmetric)

- 積分法が対称である↔

$$\Gamma_{-\tau} = \Gamma_{\tau}^{-1} \text{ または } \Gamma_{-\tau}^{-1} = \Gamma_{\tau}$$

- $\Gamma_{\tau,A}$と$\Gamma_{\tau,B}$はいずれも対称

$$\Gamma_{-\tau,A} = \Gamma_{\tau,A}^{-1}, \quad \Gamma_{-\tau,B} = \Gamma_{\tau,B}^{-1}$$

- 演算子$\Gamma_{\tau,A}\,\Gamma_{\tau,B}$は非対称

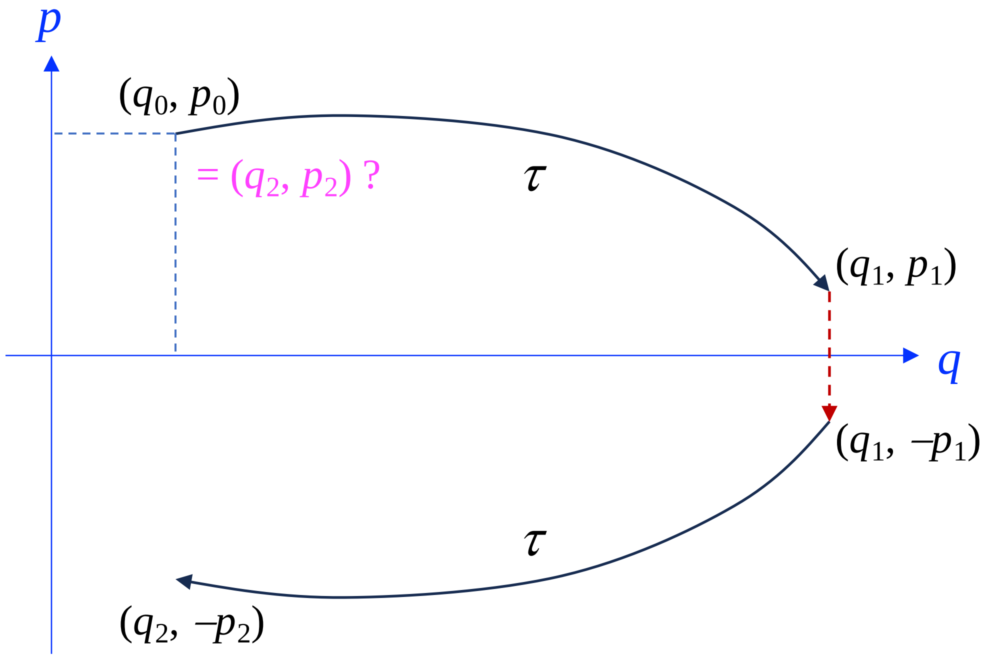
$$(\Gamma_{-\tau,A}\,\Gamma_{-\tau,B})^{-1}$$

$$= \Gamma_{-\tau,B}^{-1}\,\Gamma_{-\tau,A}^{-1}$$

（$\Gamma_{-\tau,A}\,\Gamma_{-\tau,B}\,\Gamma^{-1}{}_{-\tau,B}\,\Gamma^{-1}{}_{-\tau,A} = I$ より）

$$= \Gamma_{\tau,B}\,\Gamma_{\tau,A}$$

→ 一次のシンプレクティク積分法は非対称

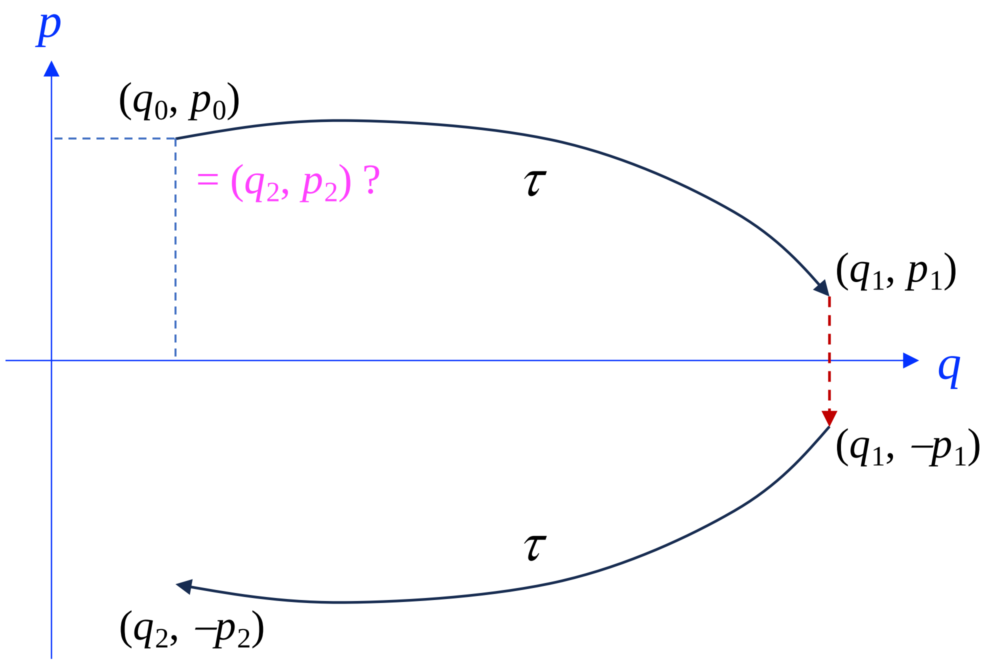


対称 (symmetric)

- 演算子$\Gamma_{\tau/2,A}\,\Gamma_{\tau,B}\,\Gamma_{\tau/2,A}$は対称

$$\Gamma_\tau = \Gamma_{\tau/2,A}\,\Gamma_{\tau,B}\,\Gamma_{\tau/2,A}$$

$$\begin{aligned}\Gamma_{-\tau}^{-1} &= \left(\Gamma_{-\tau/2,A}\,\Gamma_{-\tau,B}\,\Gamma_{-\tau/2,A}\right)^{-1}\\ &= \Gamma_{-\tau/2,A}^{-1}\,\Gamma_{-\tau,B}^{-1}\,\Gamma_{-\tau/2,A}^{-1}\\ &= \Gamma_{\tau/2,A}\,\Gamma_{\tau,B}\,\Gamma_{\tau/2,A}\end{aligned}$$



→ 二次のシンプレクティク積分法(leap frog)は対称
(対称な積分法の次数は一般に偶数)

可逆 (time-reversible)

- 積分法が正規である↔

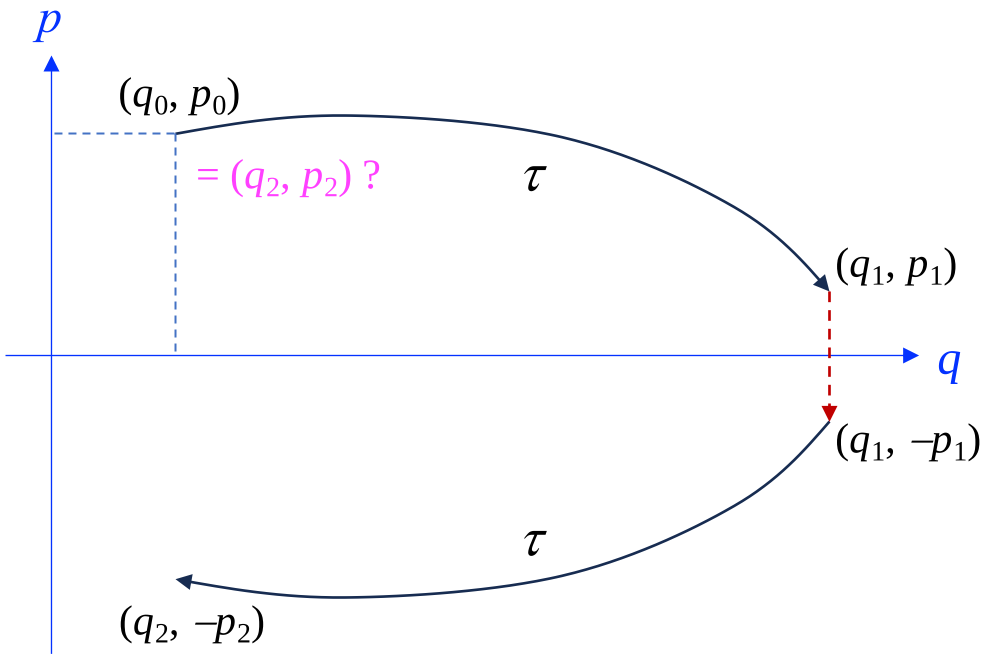
$$\Gamma_{-\tau}^{-1}\,\mathcal{T}\,\Gamma_{\tau} = \mathcal{T}$$

- 積分法が対称である↔

$$\Gamma_{\tau}^{-1} = \Gamma_{-\tau} \quad \text{または} \quad \Gamma_{-\tau}^{-1} = \Gamma_{\tau}$$

- 積分法が正規かつ対称である↔

$$\Gamma_{\tau}\,\mathcal{T}\,\Gamma_{\tau} = \mathcal{T} \qquad \rightarrow \text{この積分法は可逆}$$



➢ Leap frogは正規かつ対称 → 可逆

ややや仔細なので飛ばして良い

対称なスキームは偶数次(のみ)

- 伝搬子と積分法の差異
$$\begin{cases} \Gamma_\tau = G_\tau + \tau^{k+1} E + O(\tau^{k+2}) \\ \Gamma_{-\tau} = G_{-\tau} + (-\tau)^{k+1} E + O(\tau^{k+2}) \end{cases}$$
- 即ち
$$\Gamma_{-\tau}\, \Gamma_\tau = I + (-\tau)^{k+1} E\, G_\tau + \tau^{k+1} G_{-\tau}\, E + O(\tau^{k+2})$$
- 伝搬子の作用は以下
$$G_\tau = I + O(\tau)$$
- 即ち
$$\Gamma_{-\tau}\, \Gamma_\tau = I + \left[(-\tau)^{k+1} + \tau^{k+1}\right] E + O(\tau^{k+2})$$
- この積分法が対称ならば $\Gamma_{-\tau}\, \Gamma_\tau = \Gamma_\tau^{-1} \Gamma_\tau = I$, よって
$$\Gamma_{-\tau}\, \Gamma_\tau = I \Leftrightarrow (-\tau)^{k+1} + \tau^{k+1} = 0 \quad \rightarrow k \text{ は偶数であるべき}$$

Hairer, Lubich, Wanner (2003)
Hairer (2006)
McLachlan & Quispel (2006)

幾何学的積分法

"… One powerful approach is through **geometric integrators**, which preserve (some of) the geometric properties of the phase-space flow described by the original equation of motion." (Tremaine, 2023)

- 例1. 時間発展が正準変換であることを保つ
  - ➢ シンプレクティク数値解法

- 例2. 時間反転に対する可逆性を保つ
  - ➢ 可逆な数値解法

➢ Leap frogはいずれの性質も有する（優秀）

計算例いくつか

エネルギーと軌道位置の誤差

- ケプラー運動 → 軌道上の位置誤差 ∝ エネルギー誤差の平均値

$$\delta l \propto -\langle \delta E \rangle \cdot t$$

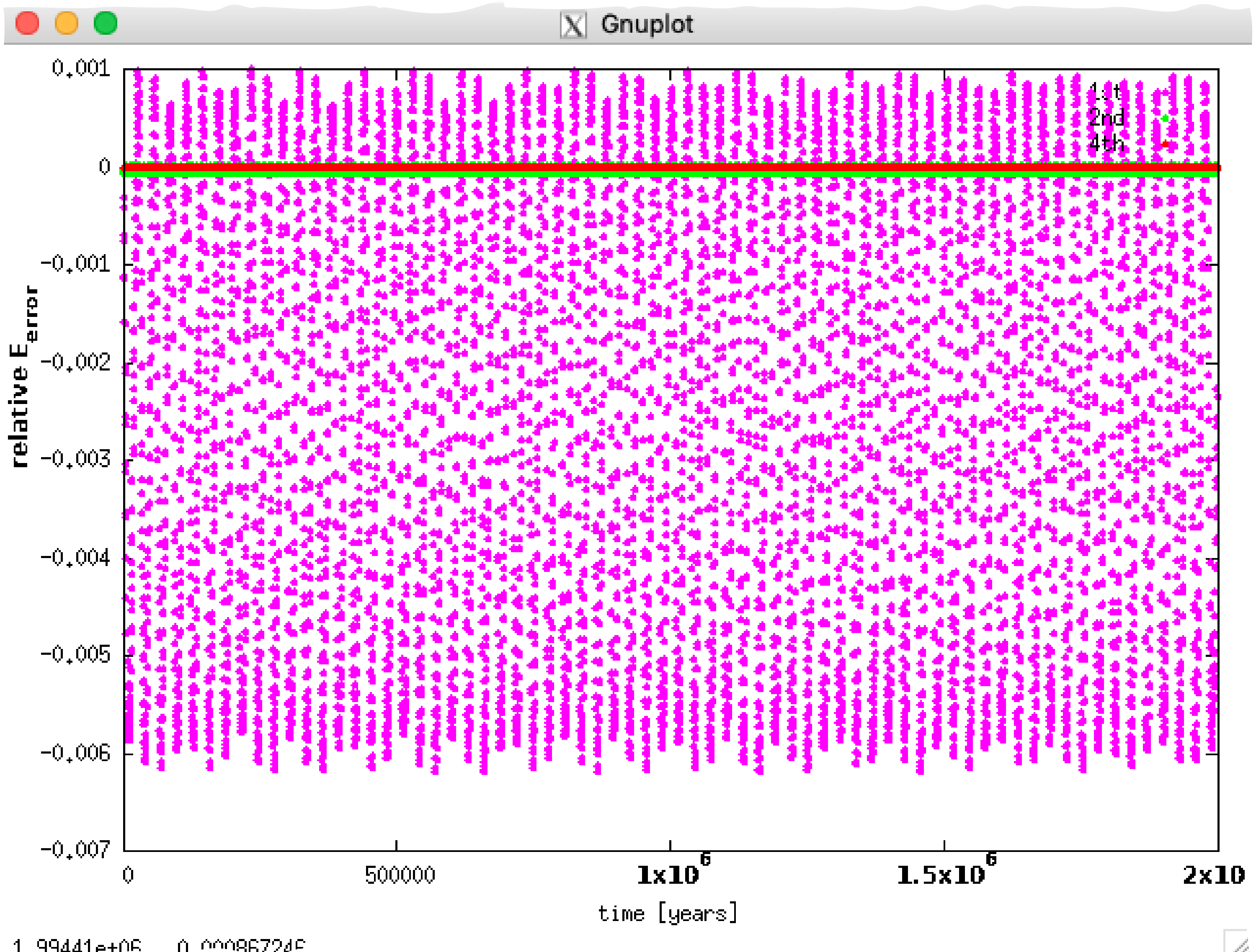
l : 平均近点離角(時刻に比例)

二体問題のエネルギー	$E \propto -a^{-1}$	a : 軌道半長径
ケプラーの第三法則	$n^2 a^3 = \text{const.}$	n : 平均運動
平均近点離角と平均運動	$l \propto nt$	

➢ エネルギー誤差(の平均値)を低減することが重要

N体の計算例（N=6, 太陽+木土天海冥）

全エネルギーの
相対誤差

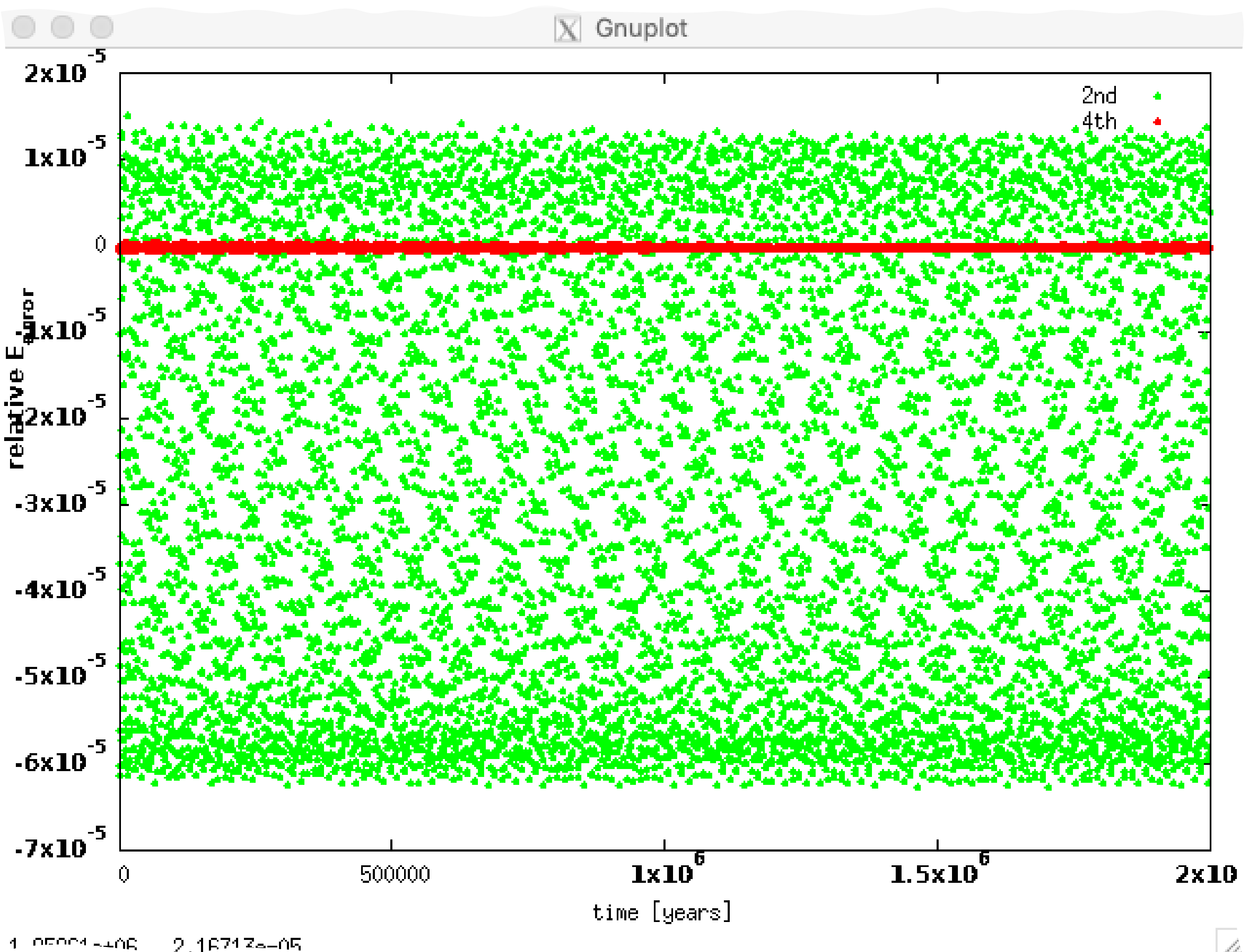


1次
2次（LF）
4次

時刻

刻み幅は全方法で共通
（以降の図でも同様）

N体の計算例（N=6, 太陽+木土天海冥）



全エネルギーの
相対誤差

● 2次（LF）
● 4次

時刻

演算子(ハミルトニアン)の分割

- $H = T(p) + V(q)$ に限らない
  - それぞれが積分可能なら何でも良い
- 例. スペースデブリの運動に関する論文から

"Let us consider the following autonomous Hamiltonian function

$$\mathcal{H}(\boldsymbol{v}, \Lambda, \boldsymbol{r}, \theta) = \mathcal{H}_{\mathrm{kepl}}(\boldsymbol{v}, \boldsymbol{r}) + \mathcal{H}_{\mathrm{rot}}(\Lambda) + \mathcal{H}_{\mathrm{geopot}}(\boldsymbol{r}, \theta) + \mathcal{H}_{\mathrm{3body}}(\boldsymbol{r}) + \mathcal{H}_{\mathrm{srp}}(\boldsymbol{r})$$

"

Hubaux+ (2012)

演算子(ハミルトニアン)の分割

- 摂動が小さな系では以下の分割が有効

$$H = H_0 + H_1, \quad H_1/H_0 \ll 1$$

- 以下のように記す

$$H = H_0 + \epsilon H_1, \quad \epsilon \ll 1$$

- 誤差ハミルトニアン (二次)

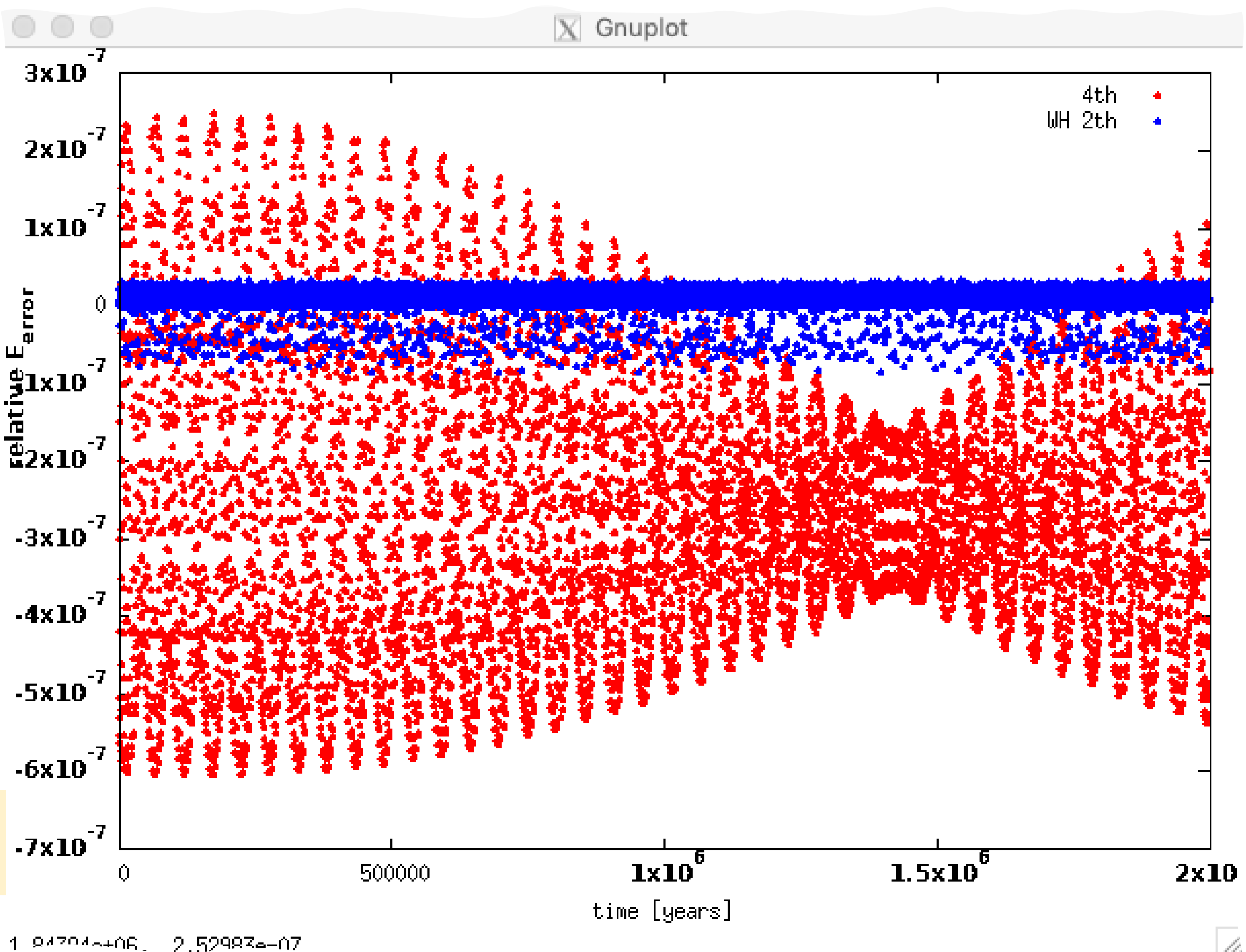
$$H_{\text{error}} = \frac{\epsilon\tau^2}{24}\left\{\left\{H_0, H_1\right\}, H_0\right\} + O(\epsilon^2\tau^2) + O(\tau^4)$$

- 例. 太陽系天体の運動

$$H = H_{\text{kepler}}(\boldsymbol{L}) + \epsilon H_{\text{interaction}}(\boldsymbol{r}), \quad \epsilon \sim 10^{-3}$$

N体の計算例（N=6, 太陽+木土天海冥）

全エネルギーの
相対誤差



● 4次 $(T+V)$

● 2次 LF $(H_{\rm kep}+\epsilon H_{\rm int})$

時刻

4次の方法の"うなり"は出力間隔の
エイリアシング、または何らかの
内部共鳴。誤差の平均値は増減しない

演算子(ハミルトニアン)の分割

- 誤差の主要項の大きさを不変に保つ要請

$$\epsilon \tau_{\mathrm{new}}^2 = \tau^2$$

- 従来の分割での刻み幅 τ
- 新しい分割での刻み幅 τ_{new}

- 新しい刻み幅

$$\tau_{\mathrm{new}} = \epsilon^{-1/2} \tau$$

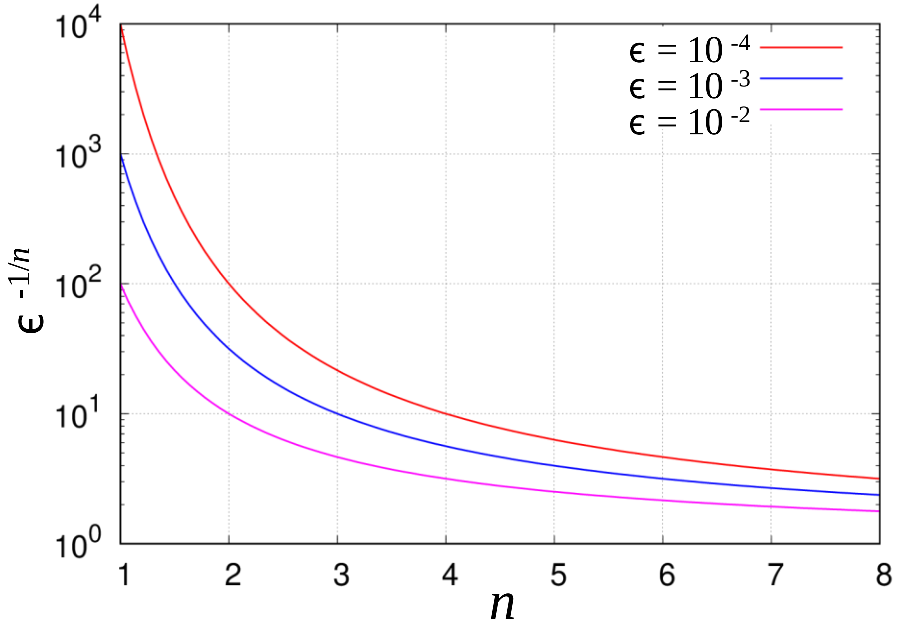
- 太陽系では $\epsilon \sim 10^{-3}$
  $\rightarrow \tau_{\mathrm{new}} \sim 32\ \tau$

- n次の方法で同様な要請

$$\epsilon \tau_{\mathrm{new}}^n = \tau^n$$

- 新しい刻み幅

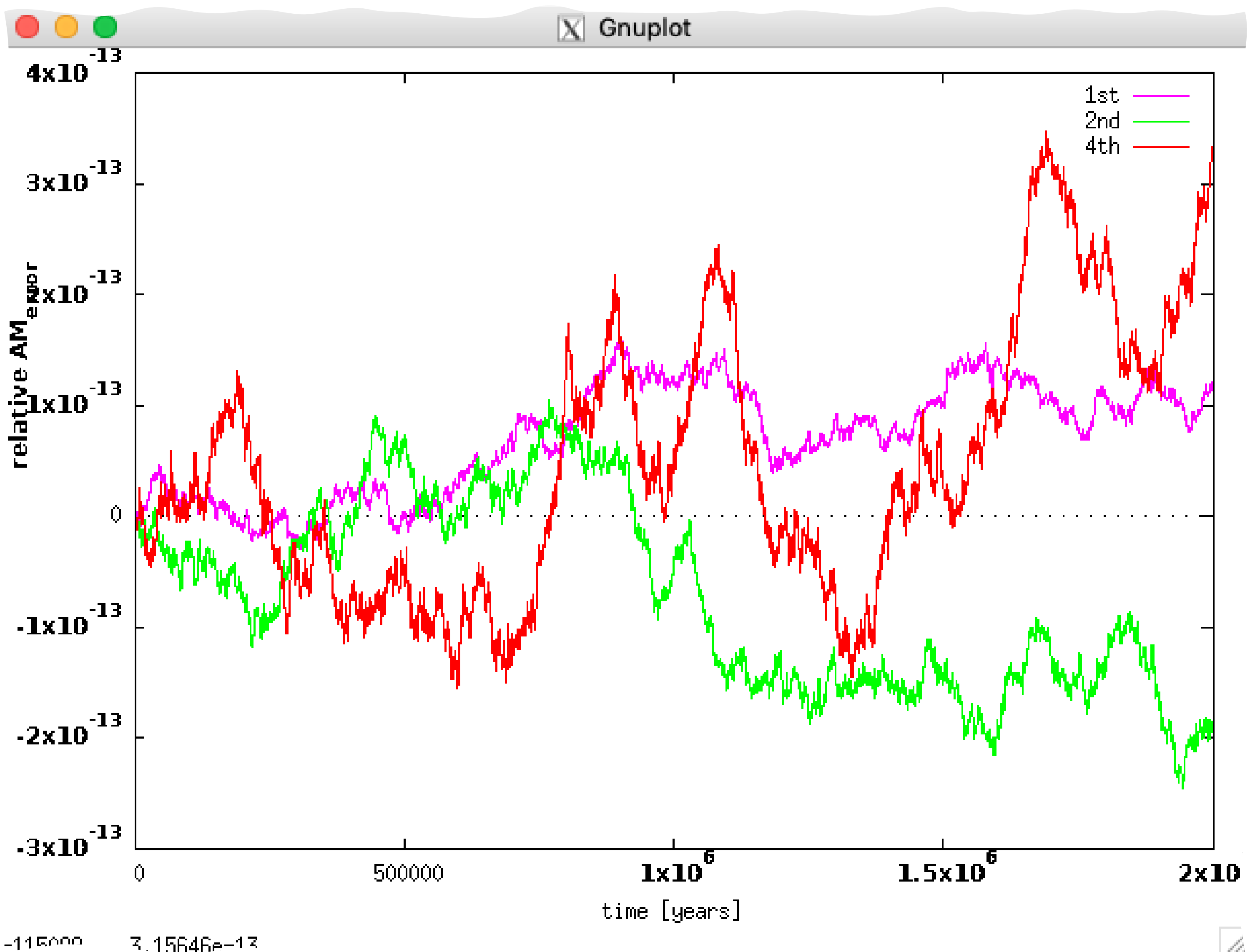
$$\tau_{\mathrm{new}} = \epsilon^{-1/n} \tau$$



➢ 次数 n は小さい方が「お得」

N体の計算例（N=6, 太陽+木土天海冥）

全角運動量の相対誤差



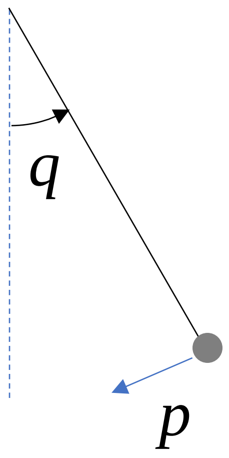
1次
2次（LF）
4次

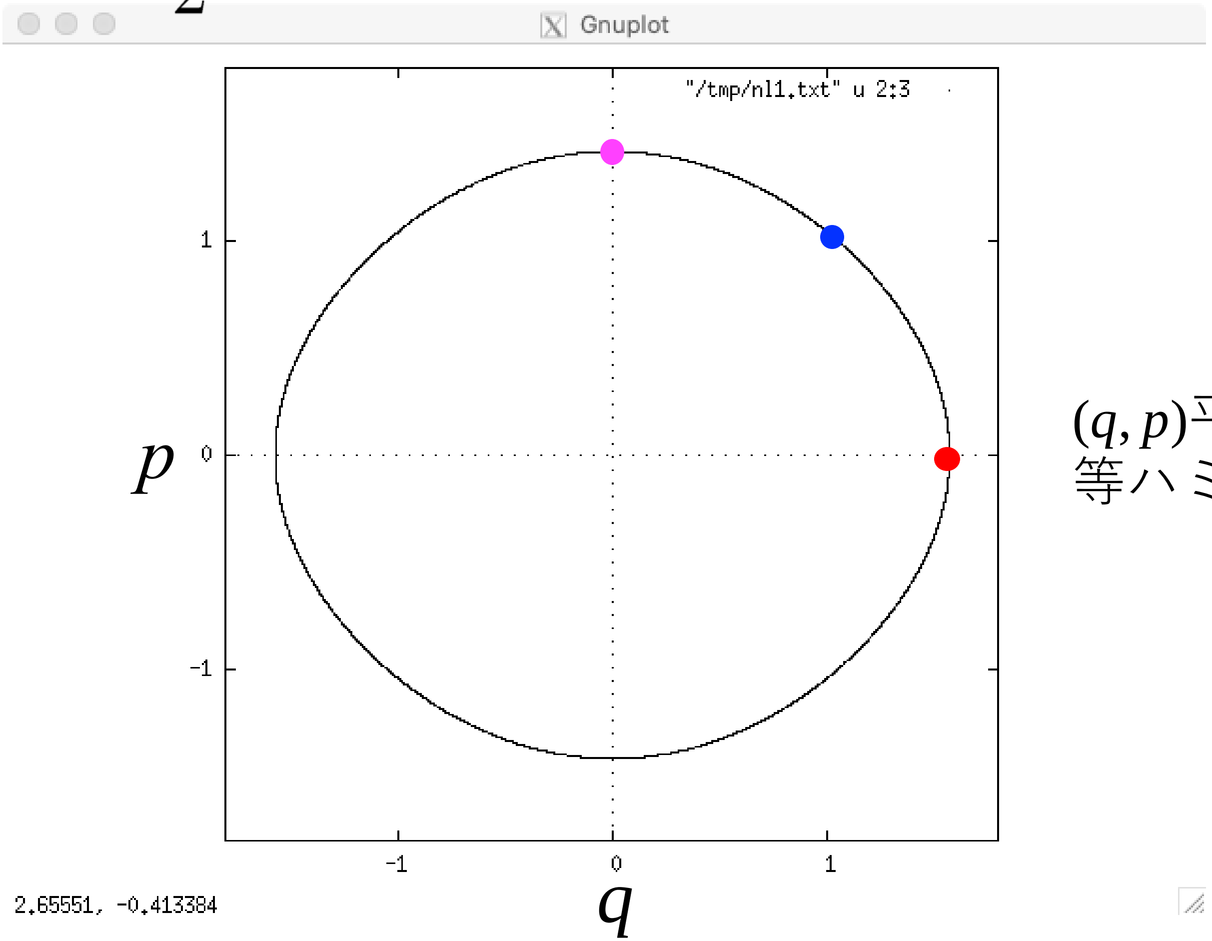
次数による誤差の差異が無い

時刻

初期軌道とエネルギー誤差

- 例. 振り子 $H = \dfrac{p^2}{2} + (1 - \cos q)$





(q, p)平面に描いた或る等ハミルトニアン(H)線

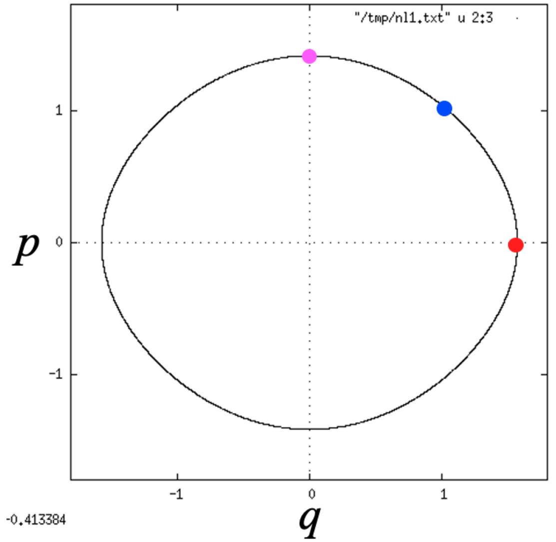
$(q_0, p_0) = (\pi/2, 0)$

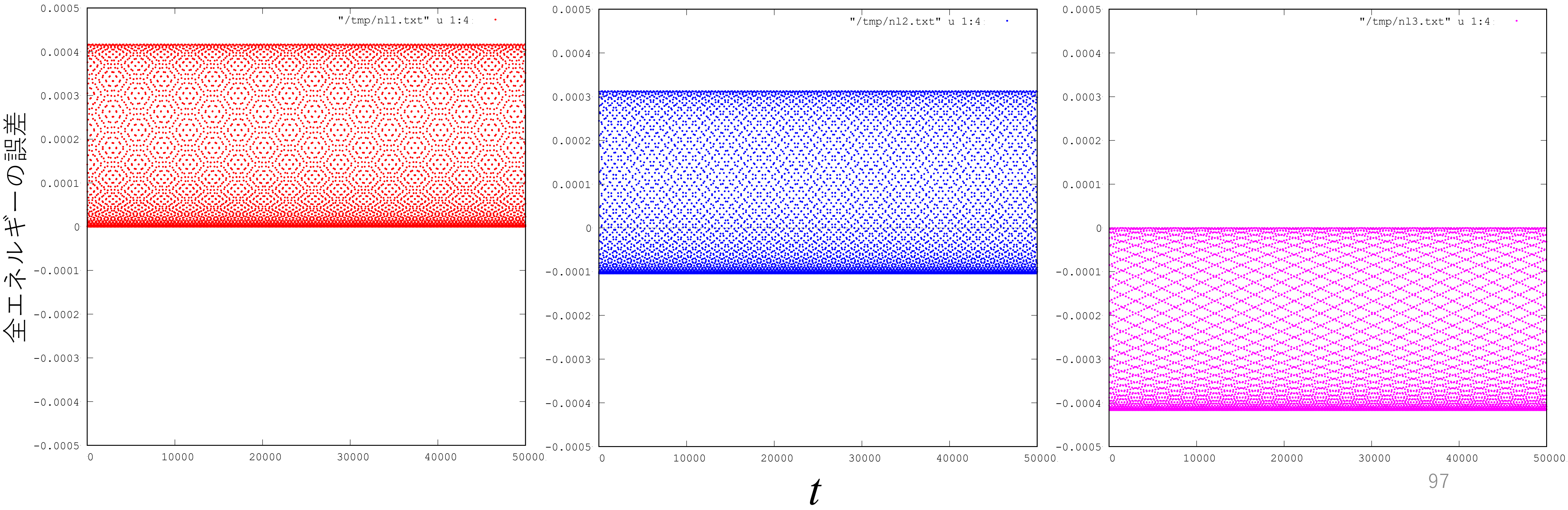
$(q_0, p_0) = (\pi/3, 1)$

$(q_0, p_0) = (0, \sqrt{2})$

初期軌道とエネルギー誤差

- 全エネルギーの誤差
  - その平均値は出発点(初期軌道)に依存する



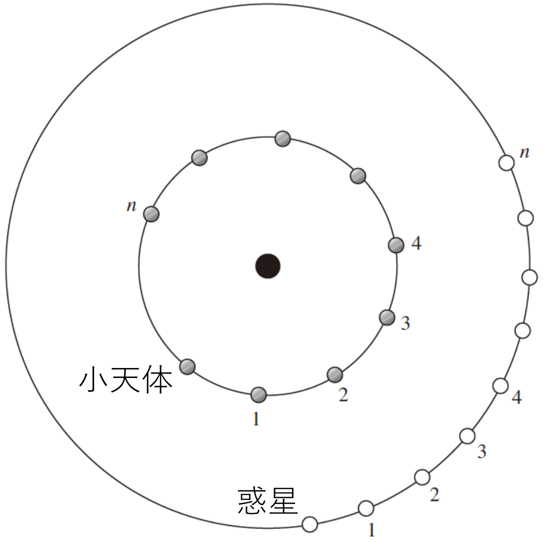


やや仔細なので飛ばして良い

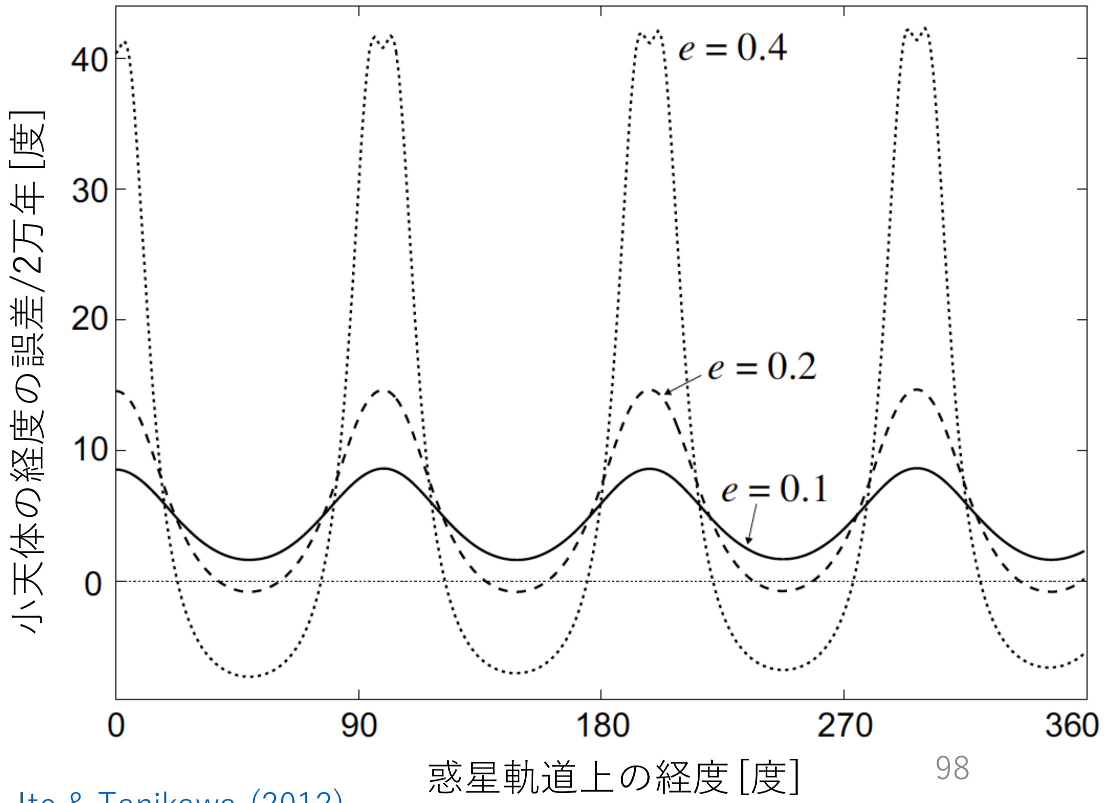
初期軌道とエネルギー誤差

- エネルギー誤差が極小となる軌道が初期軌道の近傍に存在する

- それを探す方法がある
    - 逐次出発
    - 暖気出発
    - シンプレクティク修正子



e : 小天体の初期離心率



Ito & Tanikawa (2012)

後半で述べた方法のまとめ

- 時間発展のシンプレクティク性が保たれる
  - 全エネルギーの誤差が蓄積されない
- 偶数次の解法は時間反転に対して可逆
- $H = T(p) + V(q)$ 型ではN体系の全角運動量が厳密保存される
- 正準摂動論の知識体系を活用可 → 天体力学との強い親和性
- 高精度化・高次化、階層的刻み幅、正則化、… 様々に発展中

やや仔細なので飛ばして良い

N体系全角運動量の厳密な保存

Yoshida (1990, preprint)

- 演算 $e^{\tau A}$ では T と可換な量が厳密に保存される
- 演算 $e^{\tau B}$ では V と可換な量が厳密に保存される

$$A \equiv \{\ ,T\},\quad B \equiv \{\ ,V\}$$

- 全角運動量 $L = |\boldsymbol{q} \times \boldsymbol{p}|$
  - $\{L, T\} = \{L, V\} = 0$ → L は $e^{\tau A}$ と $e^{\tau B}$ に於いて厳密に保存される
  - 各成分 L_x, L_y, L_z も同様

- 全エネルギー $E\ (= H)$
  - $\{E, T\} \neq 0, \{E, V\} \neq 0$ → E は $e^{\tau A}$ と $e^{\tau B}$ に於いて(厳密には)保存されない

全体のまとめ

- 常微分方程式の数値解法には多くの種類がある
- 解くべき問題に応じて最適な方法を選択すべし
- 計算手法の前にモデルや初期値をよく検討せよ

ご清聴ありがとうございます

この学校で様々なことを体験してください