

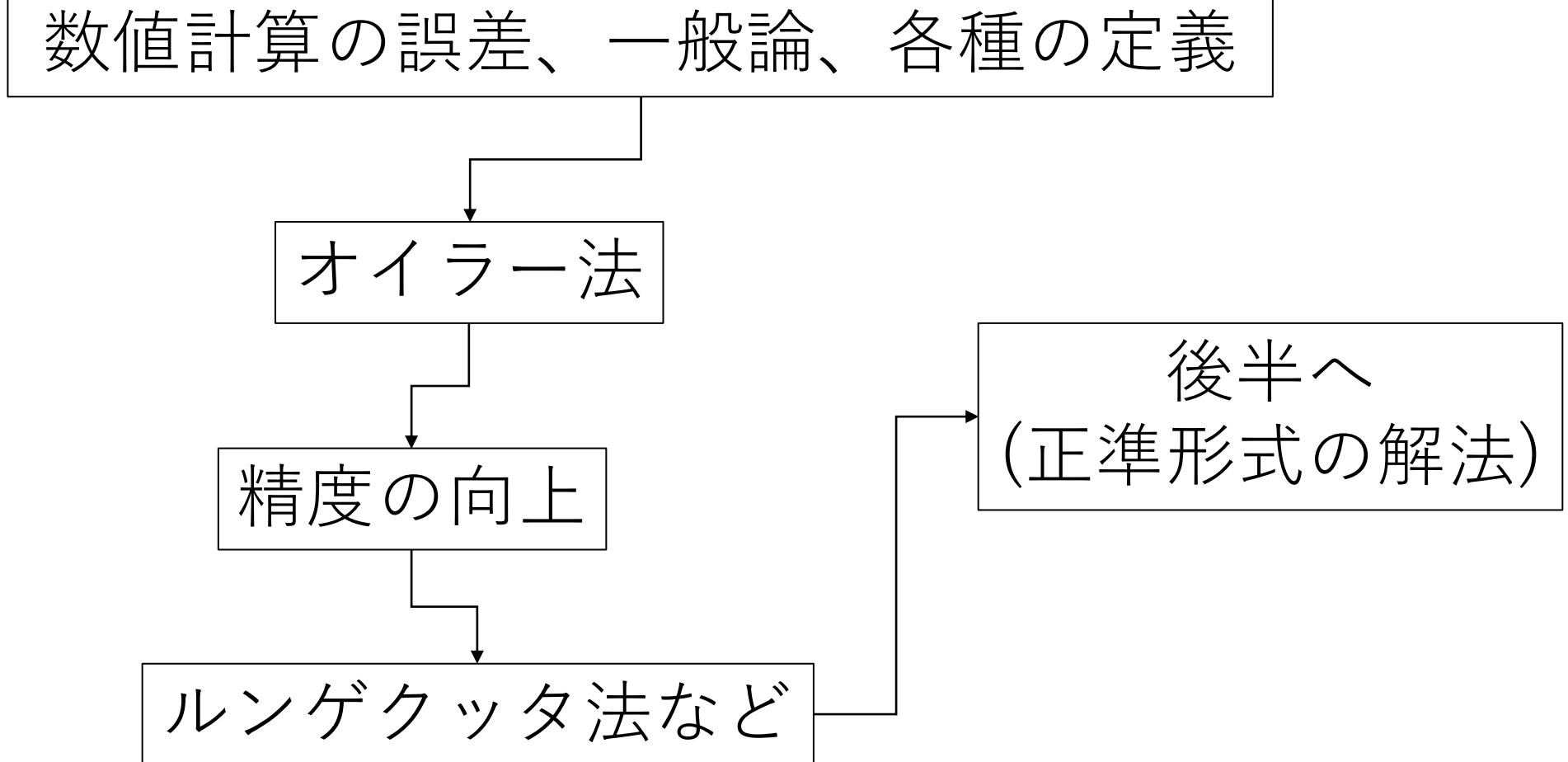
2025(令和7)年度 N体シミュレーション立春の学校

常微分方程式の数値解法 の基礎の初歩の触りの一部

2026(令和8)年 2月3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)

前半の構成



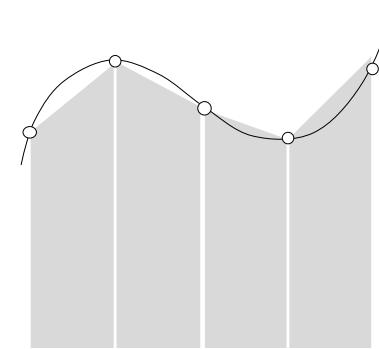
数値計算の誤差

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

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

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

- $4.6875 = 4 + 0.5 + 0.125 + 0.0625$
 $= 1*2^2 + 0*2^1 + 0*2^0 + 1*2^{-1} + 0*2^{-2} + 1*2^{-3} + 1*2^{-4}$
 $\rightarrow 100.1011$ (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 $\rightarrow 2^1 = 2$ 種類
- 2ビット $\rightarrow 2^2 = 4$ 種類
- :
- 7ビット $\rightarrow 2^7 = 128$ 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 $\rightarrow \log_{10}(2^{24}) \sim 7.22$ 桁
- 倍精度 (53ビット相当)
 - $2^{53} = 9007199254740992$ 種類 $\rightarrow \log_{10}(2^{53}) \sim 15.95$ 桁

数は無限にある

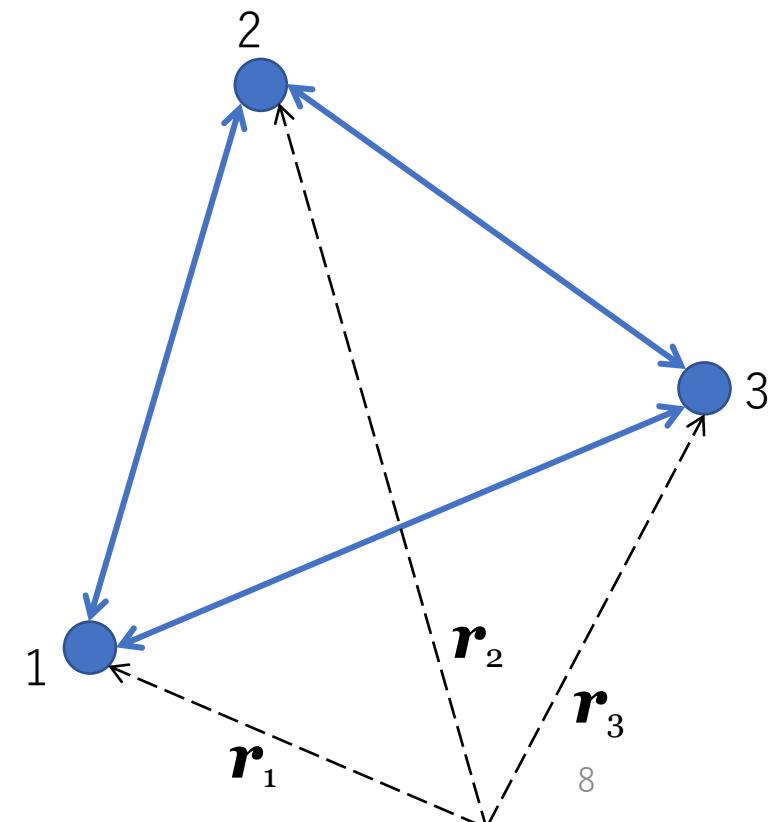
- そのうち幾つかしか表現できない
- 近くにある数で代表させる \rightarrow 「丸める」 \rightarrow [丸め誤差](#)

一般論と前置き

(重力)N体問題の運動方程式

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

- この講義で話すのは左辺の計算(時間積分)
- 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

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

$x \rightarrow t$ (時刻) とすれば時間発展の形

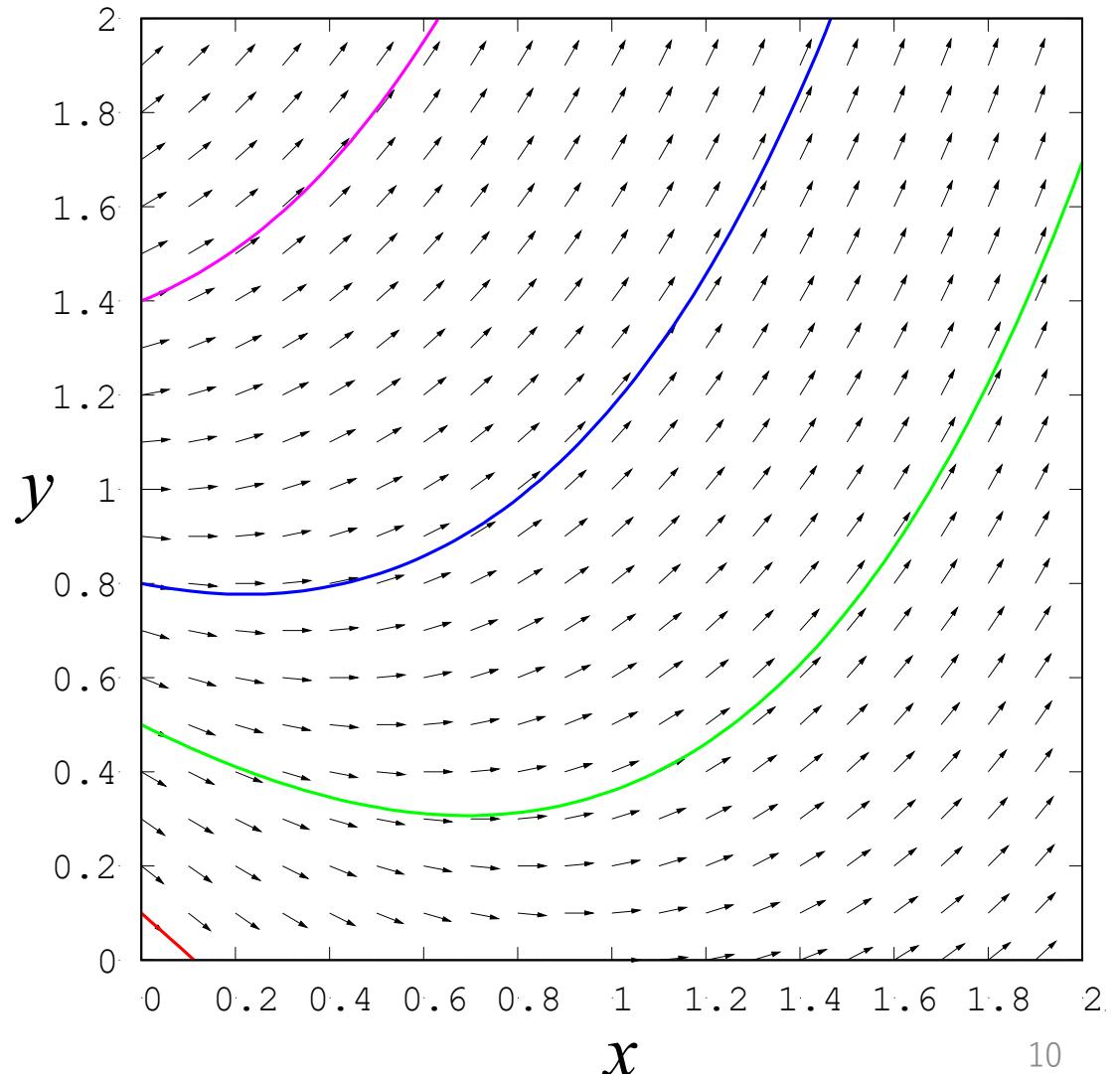
$$\frac{dy}{dt} = f(t, y)$$

注・時には x が従属変数として使われる。しかし

本講では市販の教科書たちと整合させるため、 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



階数の下げる方

- 高階の微係数 $y, y', y'', y''', \dots, y^{(n)}$ を含む場合
 - $y^{(n)} = f(x; y, y', y'', y''', \dots, y^{(n-1)})$ → 1 本の n 階常微分方程式
- 0階, 1階, ..., $n-1$ 階の微係数を別個の従属変数と見做す
 - $y \rightarrow y_0, y' \rightarrow y_1, y'' \rightarrow y_2, \dots, y^{(n-2)} \rightarrow y_{n-2}, y^{(n-1)} \rightarrow y_{n-1}$
- 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

階数の下げる方

例. 三階の常微分方程式

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

変数の置き換え

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

三本の連立一階常微分方程式に変換して解く

$$\begin{cases} y'_2 = -3y_0y_2, \\ y'_1 = y_2, \\ y'_0 = y_1 \end{cases}$$

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

階数の下げ方

重力N体系の運動方程式 → 変数 \mathbf{r} に関する二階の常微分方程式

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

速度 \mathbf{v} を新たな従属変数とし、階数を下げる

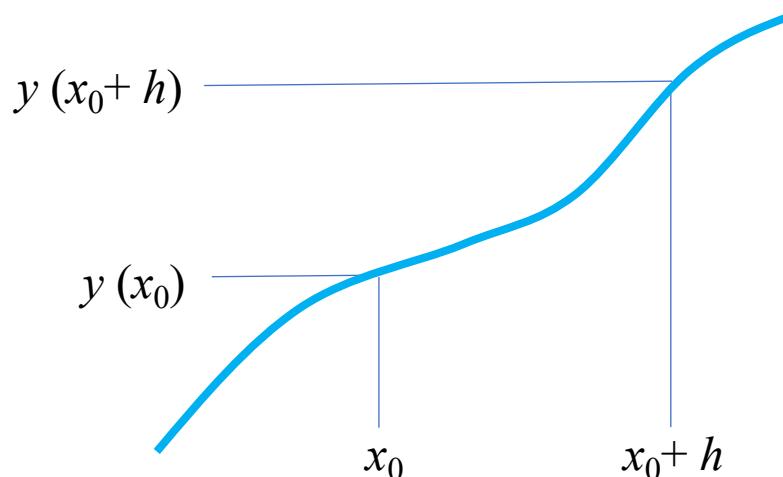
$$\begin{cases} \frac{d\mathbf{v}}{dt} = f(t; \mathbf{r}), \\ \frac{d\mathbf{r}}{dt} = \mathbf{v} \end{cases}$$

常微分方程式を「解く」

$y' = f(x, y)$ を「解く」とは？

- 以下を求め続けること

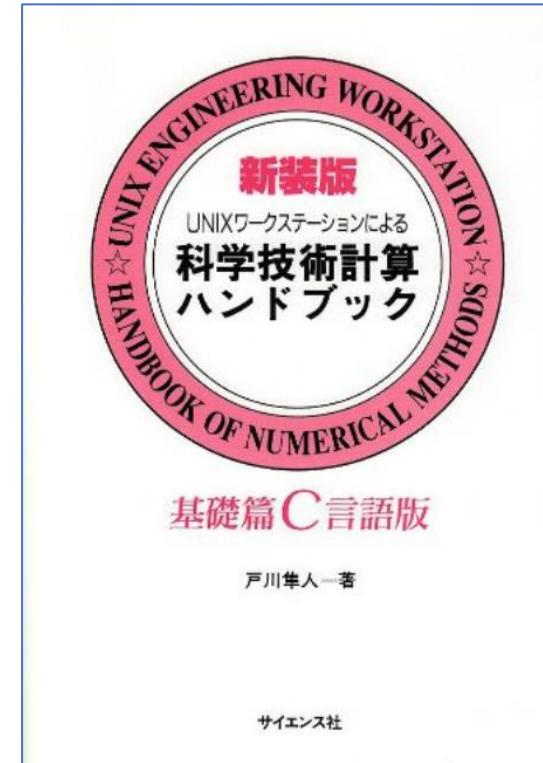
$$y(x_0 + h) = y(x_0) + \int_{x_0}^{x_0 + h} f(x, y(x)) dx$$



汎用的な解法群

汎用的な解法群

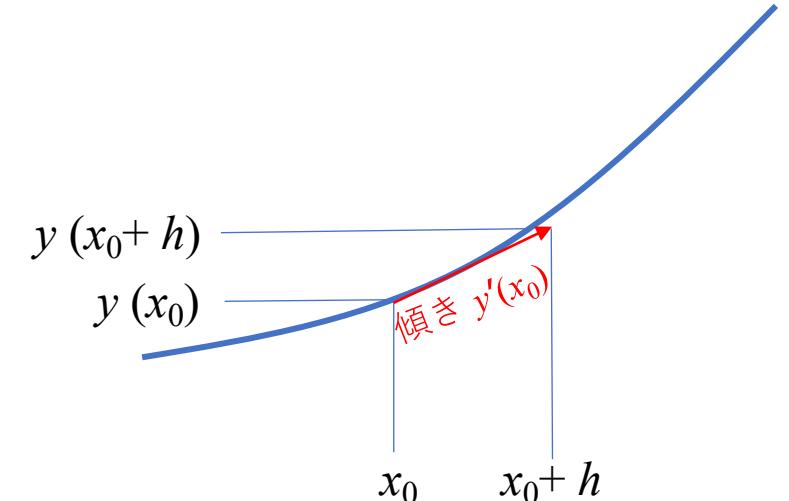
- 長い研究史と多くの成果がある
 - 電子計算機の登場よりずっと前から
- この講義(前半部)が沿う書籍 →
- 本学校の過去の講義録も参照



簡単な方法

その場の傾きから次の値を予想する

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



テイラー展開とは一次項まで一致

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

「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

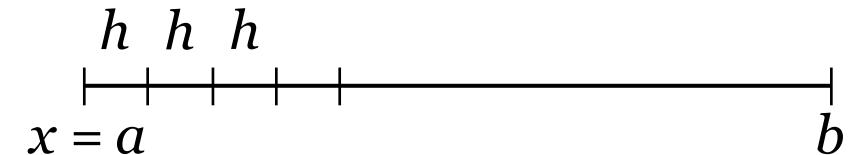
- ステップの総数 = $(b-a) / h$

全ステップで発生する誤差 (大域誤差)

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

→ オイラー法の精度は一次 $O(h^1)$

- 「次数」 = order (時にdegree)



例

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

```
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)))
    }
}
```

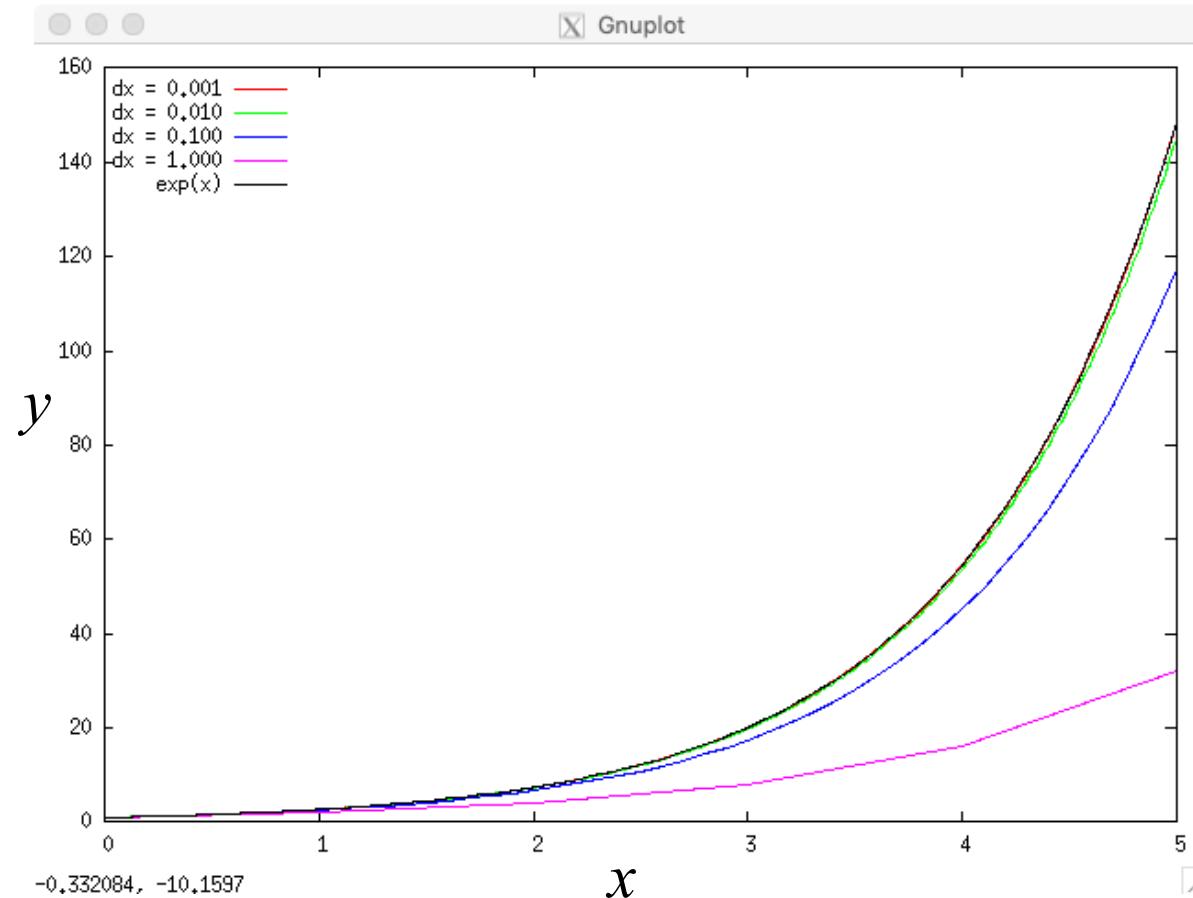
```
# y' = dy/dx = f(x, y)
function fxy(x, y) {
    return y
}

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

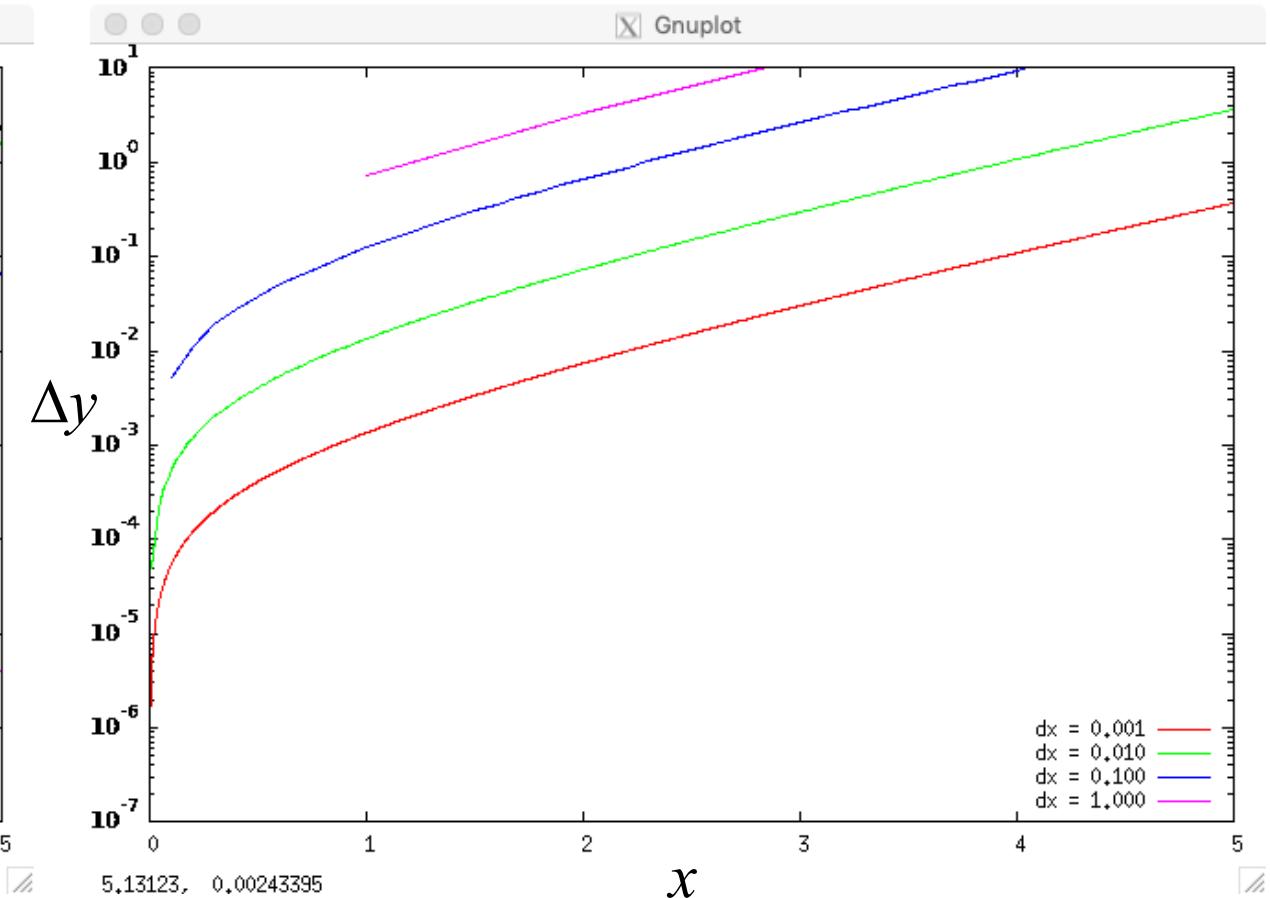
# absolute value
function fabs(x) {
    if (x >= 0) return x
    else return -x
}
```

実例

厳密解 $y = e^x$ との比較



厳密解との差分 Δy



(オイラー法) 精度の向上

- 形式的な解

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

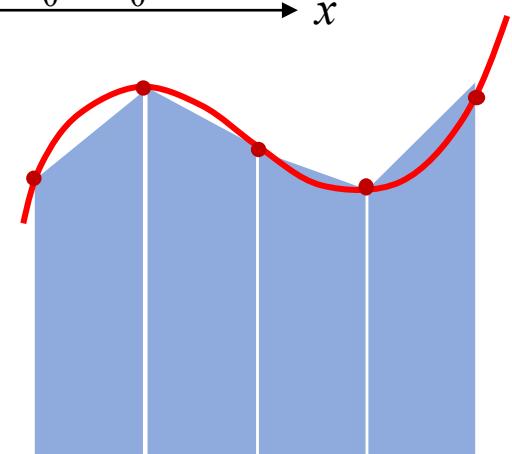
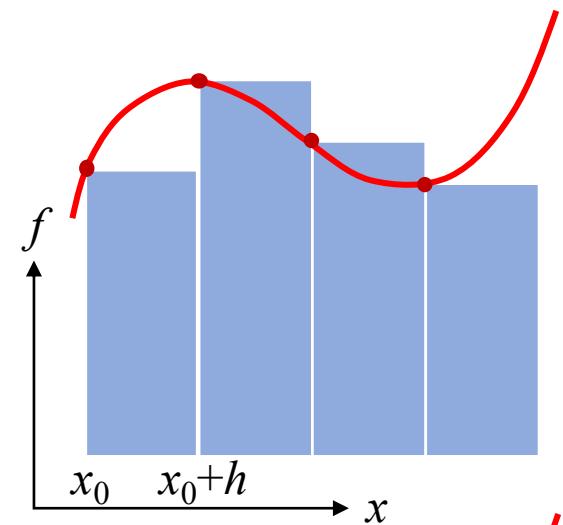
- オイラー法

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

- 台形で近似できればもっと良い

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

$$\rightarrow \frac{h}{2} (f(x_0, y(x_0)) + f(x_0 + h, y(x_0 + h)))$$



(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

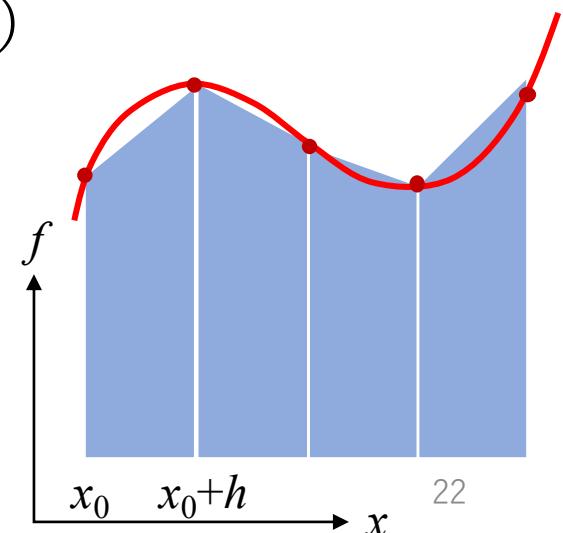
$$\overline{y(x_0 + h)} = y(x_0) + h f(x_0, y(x_0)) \quad \leftarrow y(x_0 + h) \text{ の予想値 (オイラー法)}$$

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

テイラー展開とは二次項まで一致 (各自試しましょう)

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

「修正オイラー法」、精度は二次 $O(h^2)$



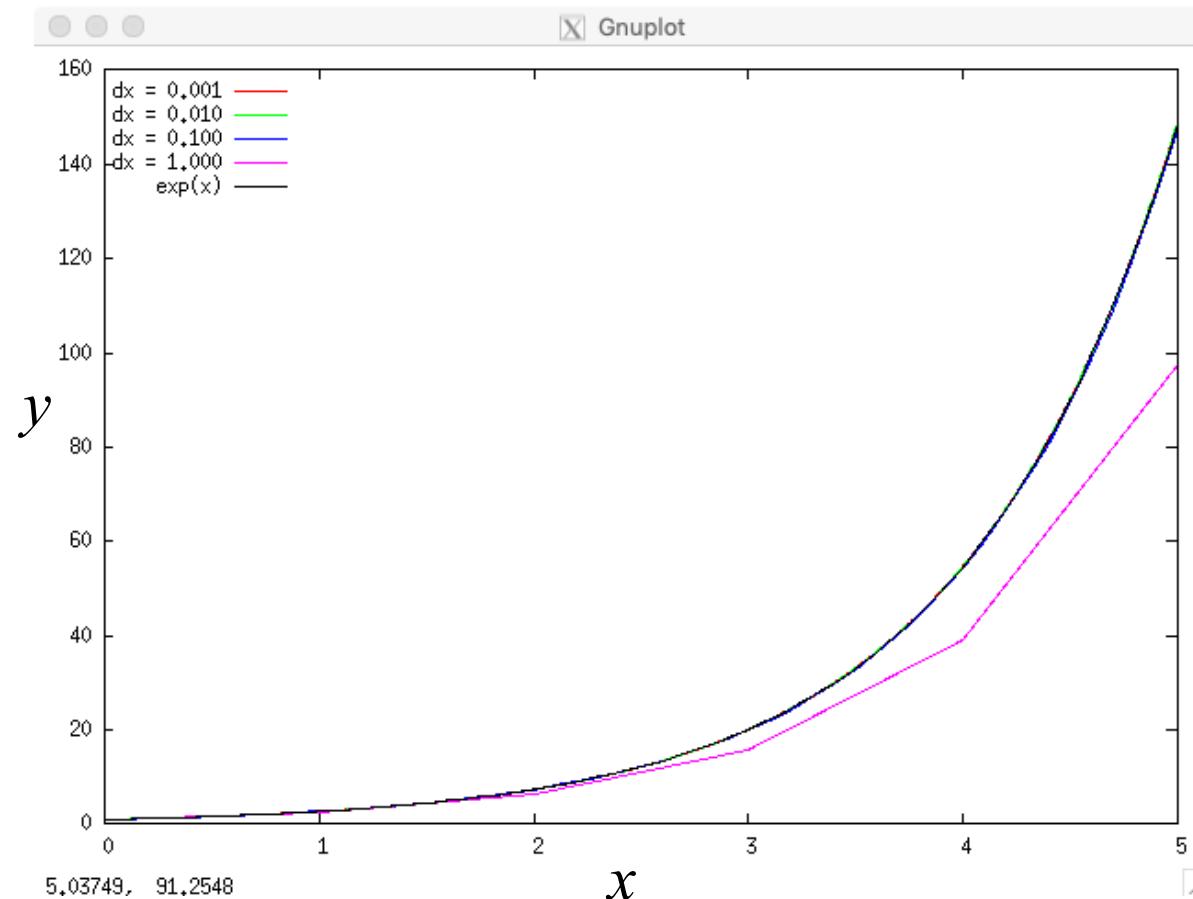
(オイラー法) 精度の向上

```
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)
}

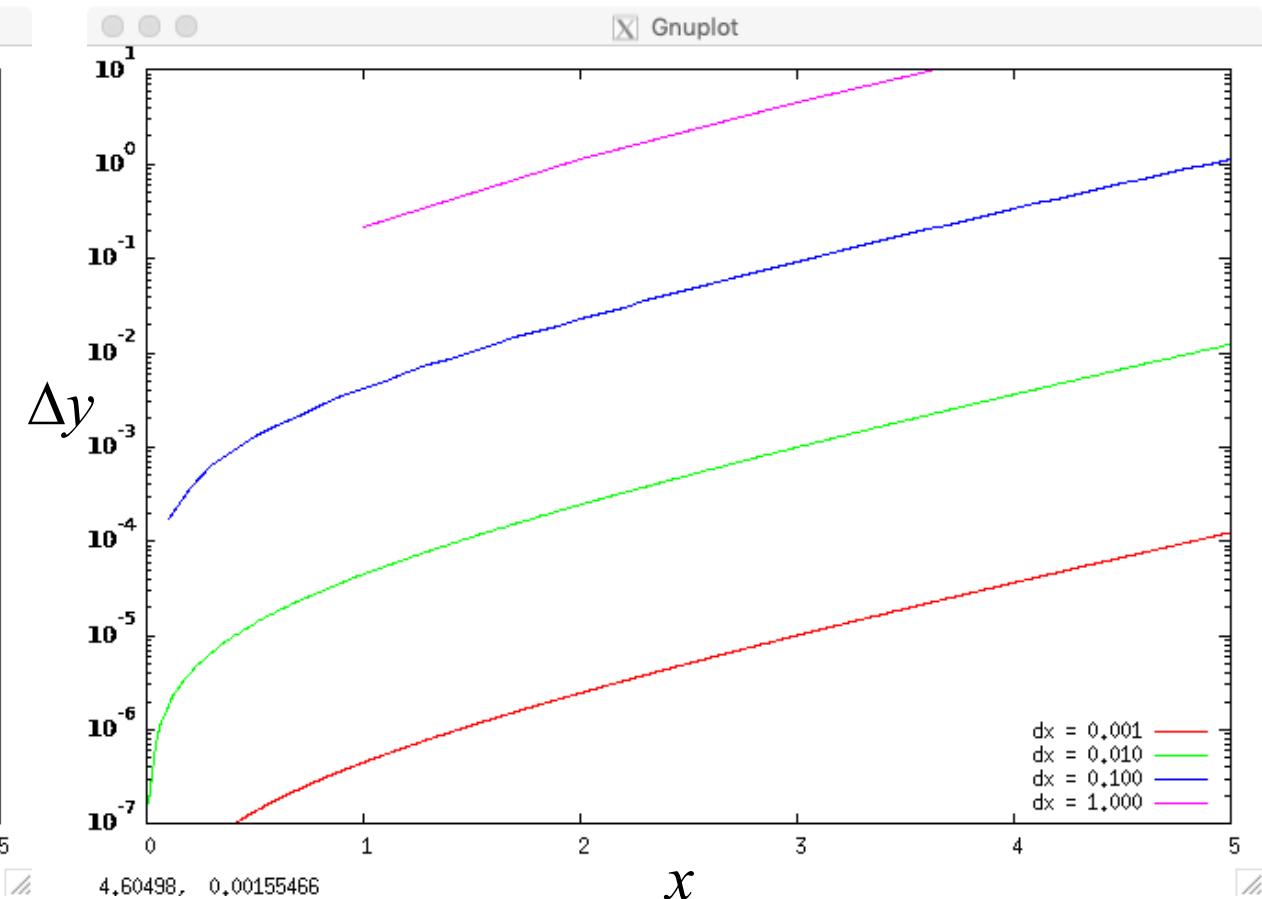
{
    x = x0
    y = y0
    while (x < xmax) {
        yeu = y + fxy(x,y)*dx                      # Euler
        y  += dx * (fxy(x,y) + fxy(x+dx,yeu))/2    # Trapezoid
        x  += dx
        printf("%e %e %e\n", x, y, fabs(y-yas(x)))
    }
}
```

(オイラー法) 精度の向上

厳密解 $y = e^x$ との比較

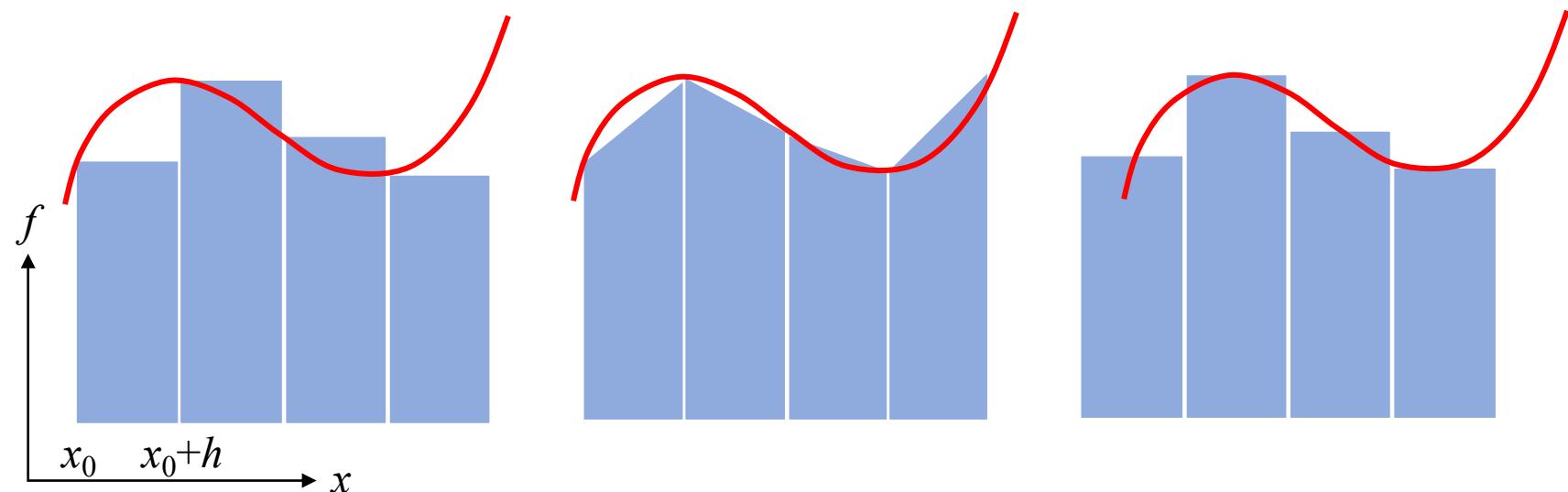


厳密解との差分 Δy



(オイラー法) 精度の向上

- 方法は他にもある



- 誤差をもっと小さくしたい → 高次化

ルンゲ・クッタ(4段)

$$k_1 = f(x_0, y(x_0)),$$

$$k_2 = f\left(x_0 + \frac{h}{2}, y(x_0) + h\frac{k_1}{2}\right),$$

$$k_3 = f\left(x_0 + \frac{h}{2}, y(x_0) + h\frac{k_2}{2}\right),$$

$$k_4 = f(x_0 + h, y(x_0) + hk_3),$$

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

- 4次の精度 $O(h^4)$
- 段数 = step

一般化の例

$$d_0 = h f(x_0, y(x_0)),$$

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

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

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

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

- これを $y(x_0 + h)$ の泰イラ一展開と比較する
- h 要求次数まで一致するように $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \beta_{10}, \dots, \gamma_0, \dots, \gamma_3$ 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

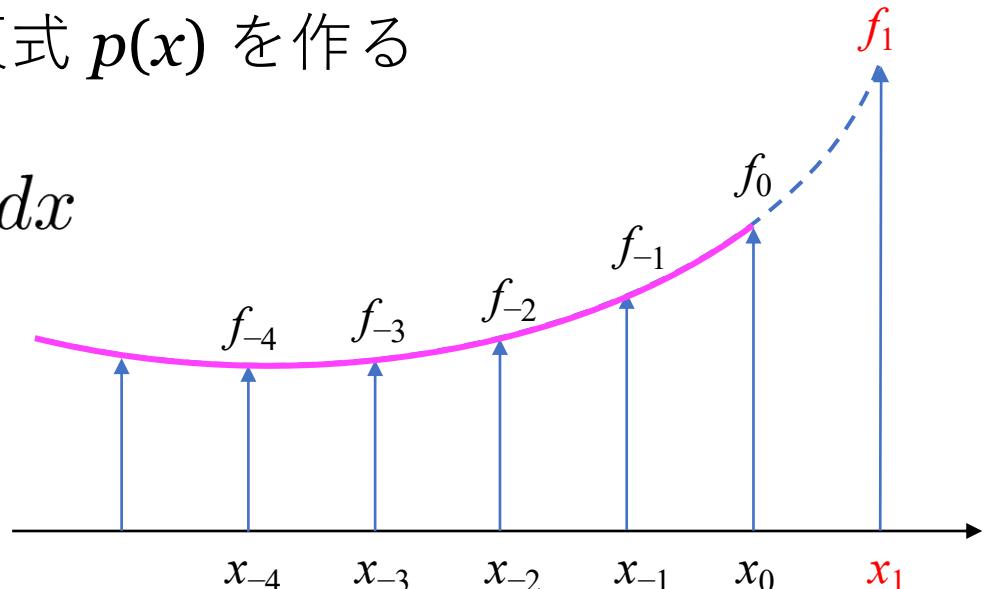
- m 次の多項式を作つて泰イラー展開を近似する

- 過去に計算した結果を使えば良いのでは？

- 例. $f_0, f_{-1}, f_{-2}, \dots$ を使い m 次の近似多項式 $p(x)$ を作る

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

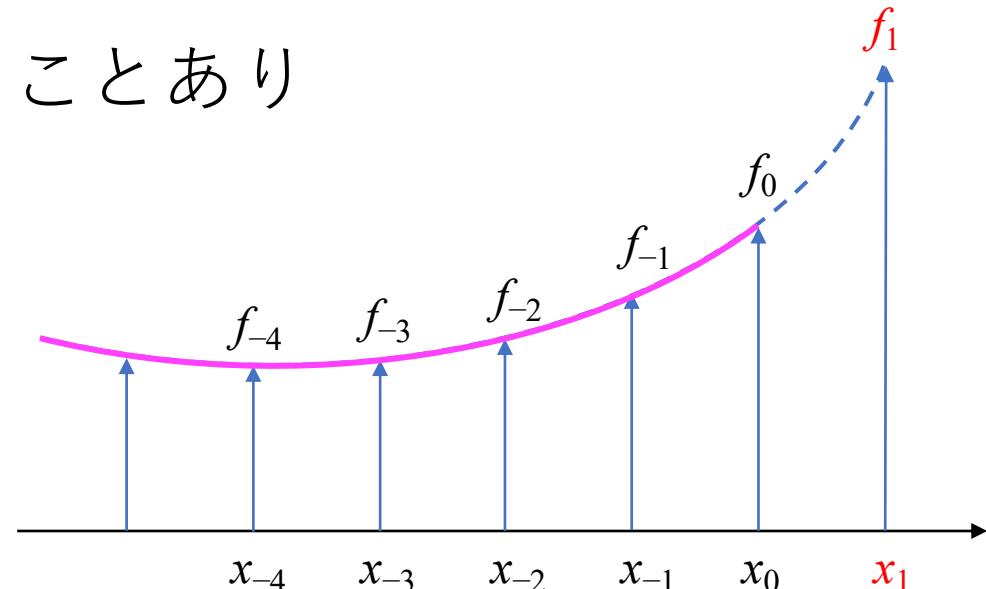
- 段数 = step



多段法（考え方のみ）

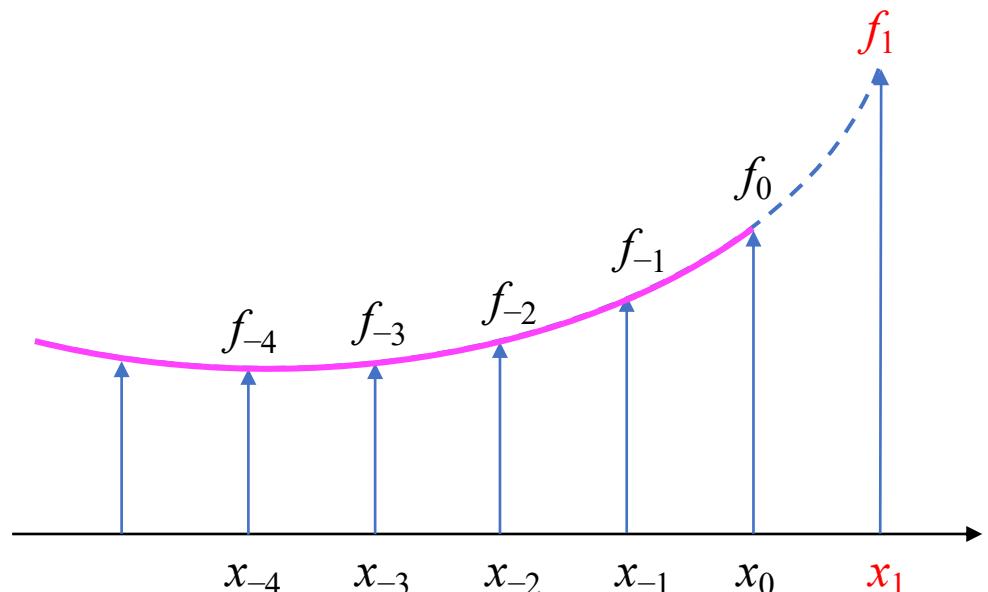
- 滑らかな系であれば高い精度を得られる
 - 例. Adams-Bashforth公式
- だが出発値を揃えるのが面倒
- 単なる外挿だと計算が不安定化することあり
- 何らかの予測 → 修正
 - 例. Adams-Moulton公式

「予測子・修正子法」



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
- 高階の導関数を使った多項式近似
 - 例. エルミート法 [Makino \(1991\)](#)など
 - 本学校の他講義を参照



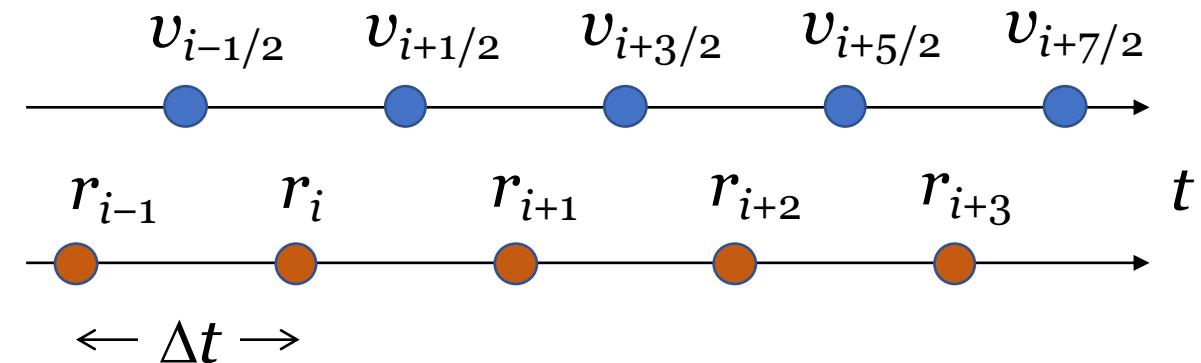
$$\frac{d^2\mathbf{r}}{dt^2} = F(\mathbf{r})$$

(本来の目的) 二階の常微分方程式

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = F(\mathbf{r}), \quad \frac{d\mathbf{r}}{dt} = \mathbf{v}$$

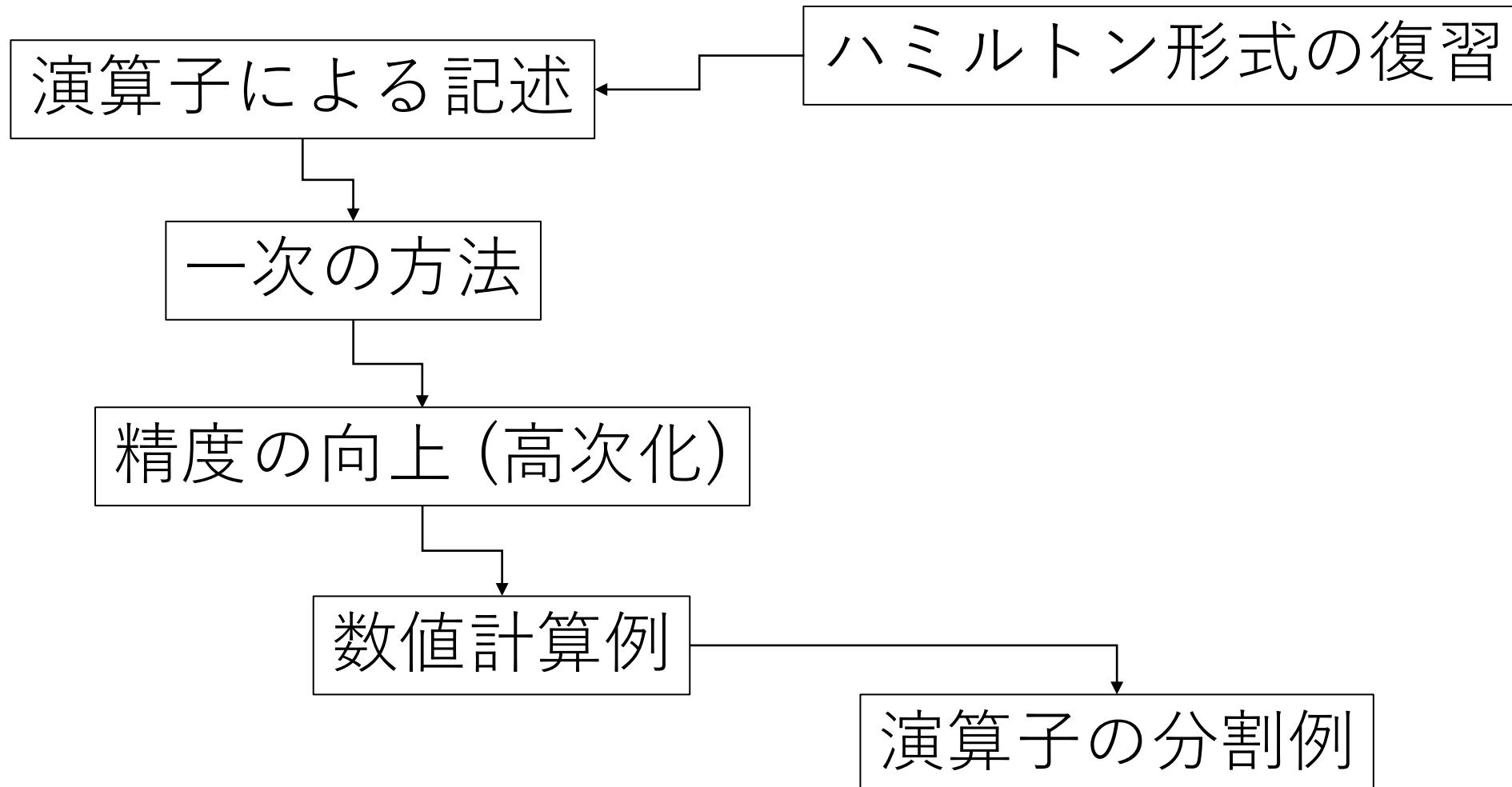
に關し、以下の方法は良い。

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{v}_{i+\frac{1}{2}} = \mathbf{v}_{i-\frac{1}{2}} + F(\mathbf{r}_i)\Delta t, \\ \mathbf{r}_{i+1} = \mathbf{r}_i + \mathbf{v}_{i+\frac{1}{2}} \Delta t \end{array} \right.$$



- 様々な名称がある
 - 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

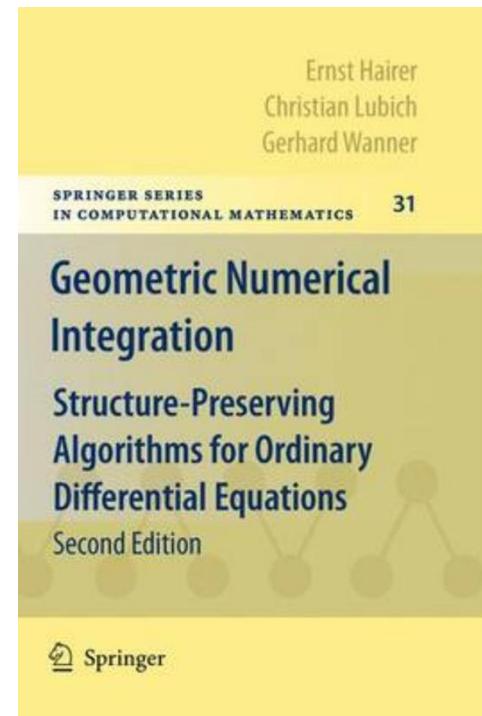
後半の構成



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) 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 q , 一般化運動量 p
- 正準運動方程式

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

- ハミルトニアン

$$\begin{aligned} H &= \text{運動エネルギー} (p \text{ の関数}) + \text{ポテンシャルエネルギー} (q \text{ の関数}) \\ &= T(p) + V(q) \end{aligned}$$

復習

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

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

復習

- 何らかの変数変換

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

- 変換のヤコビ行列

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

- 変数変換 $(q, p) \rightarrow (Q, P)$ が正準変換になる必要十分条件

$$M J M^T = J \quad \text{但し} \quad J = \begin{pmatrix} 0 & I \\ -I & 0 \end{pmatrix}$$

復習

- ハミルトン系の時間発展

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

- これを変数変換と見做す → 正準変換になっている

- ウェッジ積による表現 ($\Sigma dq \wedge dp$)
- 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 $\{, \}$

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

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)

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

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

$$+ \dots$$

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

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

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

- 以下のように記す (z に演算子 $\{, H\}$ を作用させる)

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

- $z(\tau)$ のティラー展開を考える

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

形式的な解

$$z(\tau) = z(0) + z'(0)\tau + \frac{z''(0)}{2!}\tau^2 + \frac{z'''(0)}{3!}\tau^3 + \cdots$$

$$= z(0) + \tau \{ \ , H \} z(0) + \frac{\tau^2}{2!} \{ \{ \ , H \} , H \} z(0)$$

$$+ \frac{\tau^3}{3!} \{ \{ \{ \ , H \} , H , \} , H \} z(0) + \frac{\tau^4}{4!} \{ \{ \{ \{ \ , H \} , H , \} , H \} , H \} z(0) + \cdots$$

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

$$= e^{\tau \{ \ , H \}} z(0)$$

→ 指数演算子 $e^{\tau \{ \ , H \}}$ の定義

$$z'(0) = \frac{dz}{dt} \Big|_{t=0}$$

$$z''(0) = \frac{d^2z}{dt^2} \Big|_{t=0}$$

$$z'''(0) = \frac{d^3z}{dt^3} \Big|_{t=0}$$

⋮

形式的な解

- ハミルトニアンの分割 (運動エネルギー T , ポテンシャル V)

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

- 形式的な解 $z(\tau) = e^{\tau\{\cdot, H\}} z(0)$

$$= e^{\tau\{\cdot, T+V\}} z(0)$$

$$= e^{(\tau\{\cdot, T\} + \tau\{\cdot, V\})} z(0)$$

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

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

形式的な解

- 以下の操作(演算)では厳密な解が求まる

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

- $e^{\tau A}$ を使った説明。 p に演算を施すと

$$\begin{aligned}
 e^{\tau A} p &= \left(I + \tau A + \frac{\tau^2}{2} A^2 + \cdots \right) p \\
 &= p + \tau \{p, T\} + \frac{\tau^2}{2} \{\{p, T\}, T\} + \cdots \\
 &= p + \tau \left(\frac{\partial p}{\partial q} \frac{\partial T}{\partial p} - \frac{\partial p}{\partial p} \frac{\partial T}{\partial q} \right) + \frac{\tau^2}{2} \left\{ \left(\frac{\partial p}{\partial q} \frac{\partial T}{\partial p} - \frac{\partial p}{\partial p} \frac{\partial T}{\partial q} \right), T \right\} + \cdots \\
 &= p \quad \leftarrow \text{この演算を施しても } p \text{ は不変 (定数)}
 \end{aligned}$$

形式的な解

- q に演算を施すと

$$\begin{aligned}
 e^{\tau A} q &= \left(I + \tau A + \frac{\tau^2}{2} A^2 + \dots \right) q \\
 &= q + \tau \{q, T\} + \frac{\tau^2}{2} \{\{q, T\}, T\} + \dots \\
 &= q + \tau \left(\frac{\partial q}{\partial q} \frac{\partial T}{\partial p} - \frac{\partial q}{\partial p} \frac{\partial T}{\partial q} \right) + \frac{\tau^2}{2} \left\{ \left(\frac{\partial q}{\partial q} \frac{\partial T}{\partial p} - \frac{\partial q}{\partial p} \frac{\partial T}{\partial q} \right), T \right\} + \dots \\
 &= q + \tau \frac{\partial T}{\partial p} + \frac{\tau^2}{2} \left\{ \frac{\partial T}{\partial p}, T(p) \right\} \\
 &= q + \tau \frac{\partial T}{\partial p} + \frac{\tau^2}{2} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial q \partial p} \frac{\partial T}{\partial p} - \frac{\partial^2 T}{\partial p^2} \frac{\partial T}{\partial q} \right) \\
 &= q + \tau \boxed{\frac{\partial T}{\partial p}} \rightarrow \text{この演算では } p \text{ を一定とするので定数} \rightarrow q \text{ は等速直線運動}
 \end{aligned}$$

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

形式的な解

- $e^{\tau A}$ による演算のまとめ
 - $p \rightarrow$ 不変
 - 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 (試してみましょう)
 - $q \rightarrow$ 不変
 - 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

- 真の時間発展 $e^{\tau(A+B)}$ は

$$\begin{aligned}
 e^{\tau(A+B)} &= 1 + \tau(A + B) + \frac{\tau^2}{2} (A + B)^2 + O(\tau^3) \\
 &= 1 + \tau(A + B) + \frac{\tau^2}{2} (A^2 + AB + BA + B^2) + O(\tau^3)
 \end{aligned}$$

- 厳密に求まるのは

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

または

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

一次のスキーム

- $e^{\tau B} e^{\tau A}$ 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

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

運動方程式

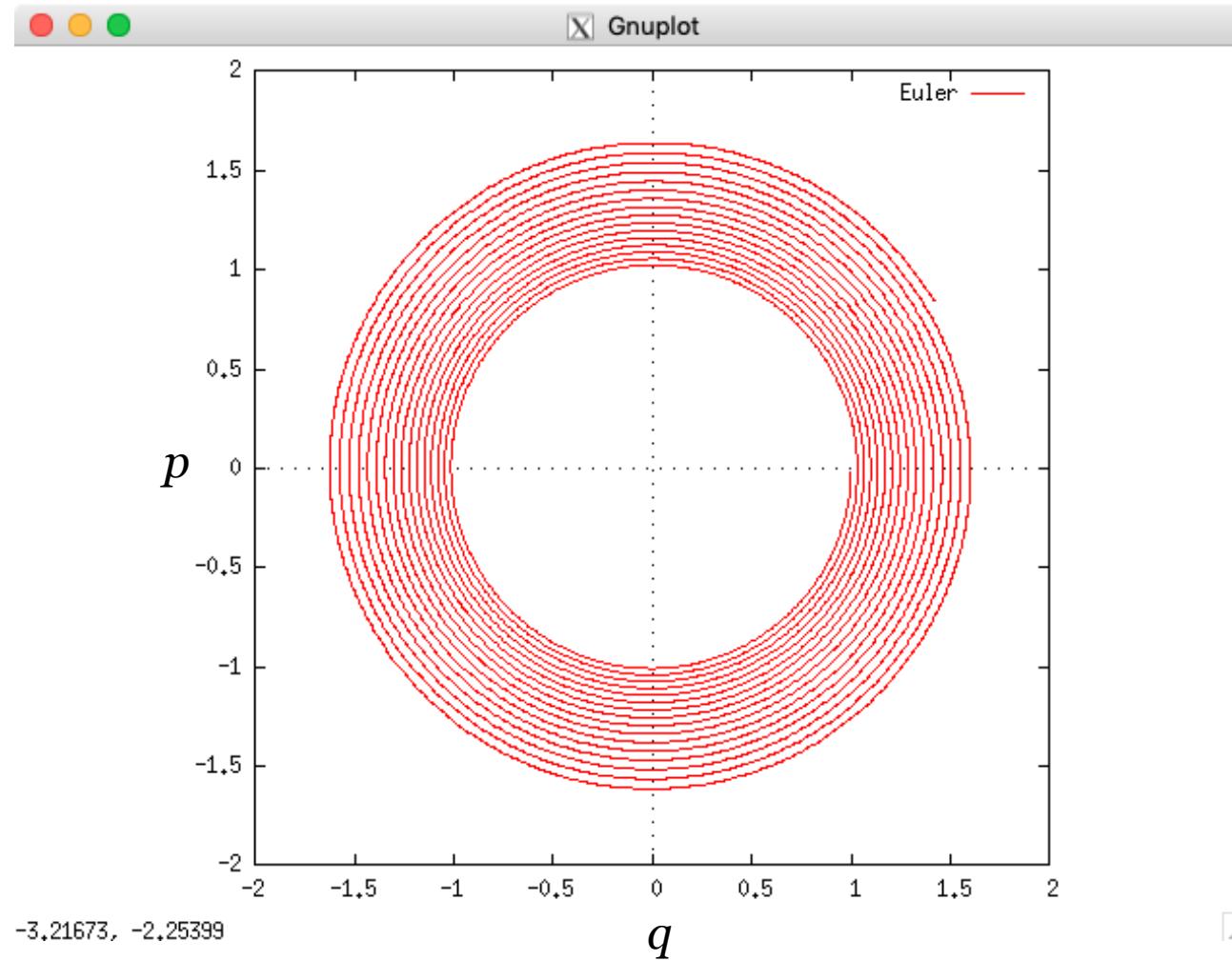
$$\frac{dq}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p} = p, \quad \frac{dp}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q} = -q$$

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

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

運動方程式

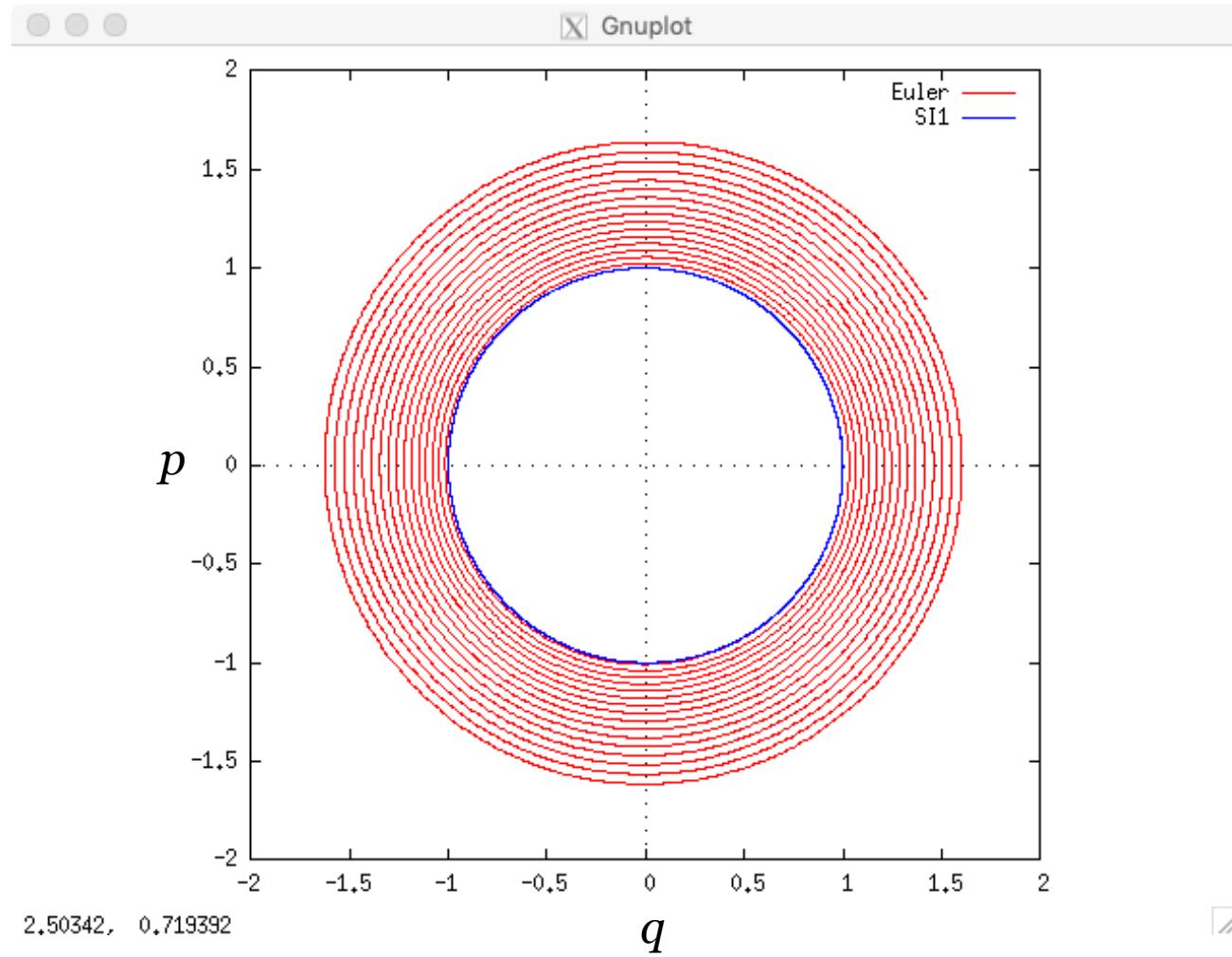
$$\frac{dq}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p} = p, \quad \frac{dp}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q} = -q$$

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



違いは少しだけ

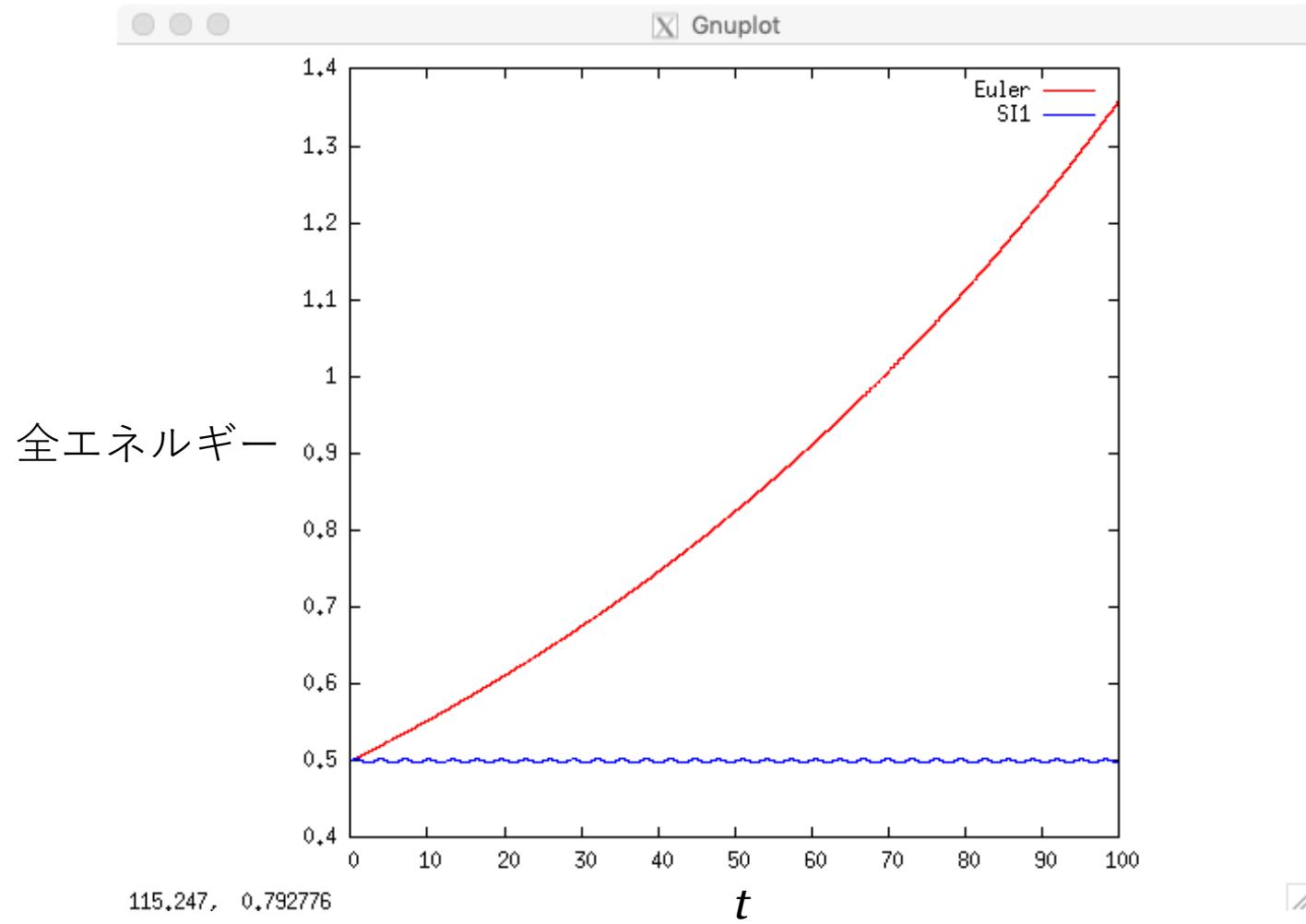
オイラー法

```
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  
}
```

エネルギーの保存状態



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)

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

- ハミルトニアン \tilde{H} とは？

$$\tilde{H} = T + V + \frac{\tau}{2} \{V, T\}$$

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

- 元々のハミルトニアン($H = T + V$)との差異は $O(\tau)$ に留まる

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 $\rightarrow [X, Y] = 0$

$$Z = X + Y$$

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

CBHD公式 (以前はBCH公式とも)
 Campbell, Baker, Hausdorff, and Dynkin

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

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

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

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

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

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

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

τ で両辺を割ってある

Jacobiの恒等式を使う

$$\begin{aligned} & \{f, \{V, T\}\} + \{V, \{T, f\}\} \\ & + \{T, \{f, V\}\} = 0 \end{aligned}$$

- 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

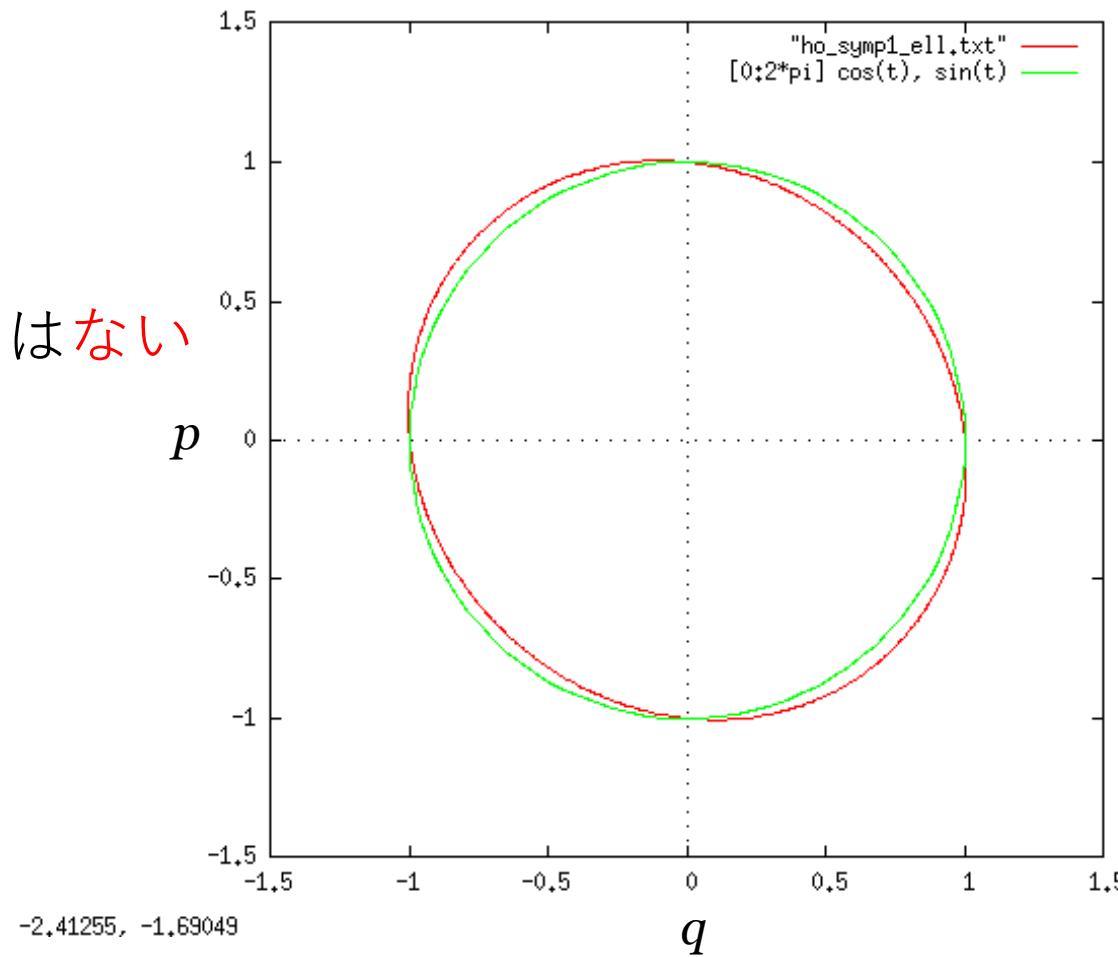
$$\tilde{H} = T + V + \frac{\tau}{2} \{V, T\} + O(\tau^2)$$

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**



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

(再掲) 正準変換

- 何らかの変数変換

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

- 変換のヤコビ行列

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

- 変数変換 $(q, p) \rightarrow (Q, P)$ が正準変換になる必要十分条件

$$\mathbf{M} \mathbf{J} \mathbf{M}^T = \mathbf{J} \quad \rightarrow \text{「シンプレクティク条件」}$$

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

一般的の演算子に適用すると

- ・時間発展を表す演算子 Γ_τ
- ・ Γ_τ の作用を表すヤコビ行列 Γ_τ
- ・ Γ_τ による演算が正準変換 \Leftrightarrow

$$\Gamma_\tau \mathbf{J} \Gamma_\tau^T = \mathbf{J}$$

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

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

演算 $e^{\tau B} e^{\tau A}$ では

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

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

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

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

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

$\boldsymbol{\Gamma}_\tau \mathbf{J} \boldsymbol{\Gamma}_\tau^T$ は $(\boldsymbol{\Gamma}_{\tau,B} \boldsymbol{\Gamma}_{\tau,A}) \mathbf{J} (\boldsymbol{\Gamma}_{\tau,B} \boldsymbol{\Gamma}_{\tau,A})^T$

$$= \begin{pmatrix} 1 & \tau \frac{\partial^2 T}{\partial p^2} \\ -\tau \frac{\partial^2 V}{\partial q'^2} & 1 - \tau^2 \frac{\partial^2 T}{\partial p^2} \frac{\partial^2 V}{\partial q'^2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & -\tau \frac{\partial^2 V}{\partial q'^2} \\ \tau \frac{\partial^2 T}{\partial p^2} & 1 - \tau^2 \frac{\partial^2 T}{\partial p^2} \frac{\partial^2 V}{\partial q'^2} \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$$

$= \mathbf{J}$ \rightarrow シンプレクトイク条件を満たす \rightarrow 正準変換

(話を戻して) 精度の向上

- 高次スキームの一般形

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

- 以下の各々を代入

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

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

- $A, B, A^2, AB, BA, B^2, \dots$ の係数を比較し、未知数 $c_1, c_2, \dots, d_1, d_2, \dots$ (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
      + 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)

$$c_1 = \frac{1}{2}$$

$$d_1 = 1$$

$$c_2 = \frac{1}{2}$$

$$d_2 = 0$$

$$(k = 2)$$

二次の方法

形式的に書けば

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

実際的な書き下し

$$q^* = q(0) + \frac{\tau}{2} \left. \frac{\partial T}{\partial p} \right|_{p(0)}$$

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

$$q(\tau) = q^* + \frac{\tau}{2} \left. \frac{\partial T}{\partial p} \right|_{p(\tau)}$$

Leapfrog と等価

二次の方法 (Leapfrog) 調和振動子

```
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)
    }
}
```

ハミルトニアン

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

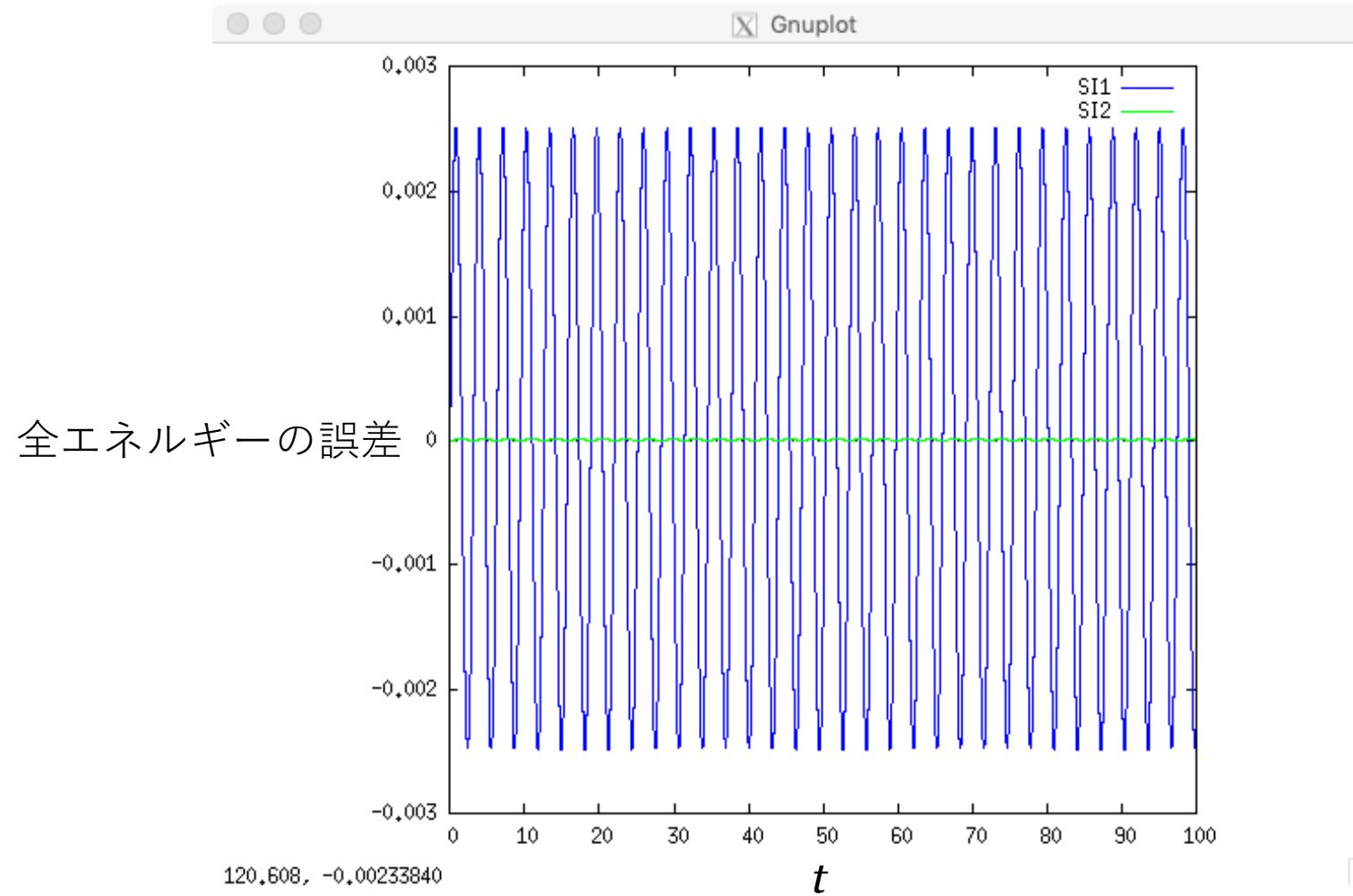
運動方程式

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

厳密解 (位相空間内の回転)

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

二次の方法 (Leapfrog)



一次
二次 (Leapfrog)

二次の方法 (Leapfrog)

- 計算スキーム(左辺)、それが支配する系(右辺)

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

- ハミルトニアン \tilde{H}

$$\tilde{H} = T + V$$

誤差ハミルトニアン

$$+ \frac{\tau^2}{24} (2\{\{T, V\}, V\} - \{\{V, T\}, T\}) + O(\tau^4)$$

- 元々のハミルトニアン($H = T + V$)との差異は $O(\tau^2)$ に留まる

演算 $e^{\tau A/2} e^{\tau B} e^{\tau A/2}$ では

- $e^{\tau A/2}$ の作用 : $q^* = \Gamma_{\frac{\tau}{2}, A}^* q = q + \frac{\tau}{2} \frac{\partial T}{\partial p} \Big|_p$

$$\boldsymbol{\Gamma}_{\frac{\tau}{2}, A}^* = \frac{\partial(q^*, p)}{\partial(q, p)} = \begin{pmatrix} \frac{\partial q^*}{\partial q} & \frac{\partial q^*}{\partial p} \\ \frac{\partial p}{\partial q} & \frac{\partial p}{\partial p} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & \frac{\tau}{2} \frac{\partial^2 T}{\partial p^2} \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

- $e^{\tau B}$ の作用 : $p' = \Gamma_{\tau, B} p = p - \tau \frac{\partial V}{\partial q} \Big|_{q^*}$

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

- $e^{\tau A/2}$ の作用 : $q' = \Gamma_{\frac{\tau}{2}, A} q^* = q^* + \frac{\tau}{2} \frac{\partial T}{\partial p} \Big|_{p'}$

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

演算 $e^{\tau A/2} e^{\tau B} e^{\tau A/2}$ では

積行列

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\Gamma}_{\frac{\tau}{2},A} \boldsymbol{\Gamma}_{\tau,B} \boldsymbol{\Gamma}_{\frac{\tau}{2},A}^* &= \begin{pmatrix} 1 & \frac{\tau}{2} \frac{\partial^2 T}{\partial p^2} \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -\tau \frac{\partial^2 V}{\partial q^{*2}} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & \frac{\tau}{2} \frac{\partial^2 T}{\partial p'^2} \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 1 - \frac{\tau^2}{2} \frac{\partial^2 T}{\partial p'^2} \frac{\partial^2 V}{\partial q^{*2}} & -\frac{\tau}{4} \left(\tau^2 \frac{\partial^2 T}{\partial p^2} \frac{\partial^2 T}{\partial p'^2} \frac{\partial^2 V}{\partial q^{*2}} - 2 \frac{\partial^2 T}{\partial p^2} - 2 \frac{\partial^2 T}{\partial p'^2} \right) \\ -\tau \frac{\partial^2 V}{\partial q^{*2}} & 1 - \frac{\tau^2}{2} \frac{\partial^2 T}{\partial p^2} \frac{\partial^2 V}{\partial q^{*2}} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

転置

$$\left(\boldsymbol{\Gamma}_{\frac{\tau}{2},A} \boldsymbol{\Gamma}_{\tau,B} \boldsymbol{\Gamma}_{\frac{\tau}{2},A}^* \right)^T = \begin{pmatrix} 1 - \frac{\tau^2}{2} \frac{\partial^2 T}{\partial p'^2} \frac{\partial^2 V}{\partial q^{*2}} & -\tau \frac{\partial^2 V}{\partial q^{*2}} \\ -\frac{\tau}{4} \left(\tau^2 \frac{\partial^2 T}{\partial p^2} \frac{\partial^2 T}{\partial p'^2} \frac{\partial^2 V}{\partial q^{*2}} - 2 \frac{\partial^2 T}{\partial p^2} - 2 \frac{\partial^2 T}{\partial p'^2} \right) & 1 - \frac{\tau^2}{2} \frac{\partial^2 T}{\partial p^2} \frac{\partial^2 V}{\partial q^{*2}} \end{pmatrix}$$

$\boldsymbol{\Gamma}_\tau \mathbf{J} \boldsymbol{\Gamma}_\tau^T$ は

$$\left(\boldsymbol{\Gamma}_{\frac{\tau}{2},A} \boldsymbol{\Gamma}_{\tau,B} \boldsymbol{\Gamma}_{\frac{\tau}{2},A}^* \right) \mathbf{J} \left(\boldsymbol{\Gamma}_{\frac{\tau}{2},A} \boldsymbol{\Gamma}_{\tau,B} \boldsymbol{\Gamma}_{\frac{\tau}{2},A}^* \right)^T = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} = \mathbf{J}$$

→ シンプレクトイク条件を満たす → 正準変換

連續演算時の注意点

- 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

三次の方法

形式的に書けば

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

係数

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

[Ruth \(1983\)](#)

実際的な書き方

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

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

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

四次の方法

- 形式展開

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

- 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)

- 二次の方法 S_2 を合成して構成可能 [Yoshida \(1990\)](#)

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

- 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)

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

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	$1 - 2(w_1 + w_2 + \cdots + w_7)$

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. 時間発展の正準変換性を保つ
 - シンプレクティクである
- 例2. 時間反転に関する可逆性を保つ
 - 正規かつ対称である
 - Leap frogはいずれの性質も有する

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 \propto エネルギー誤差の平均値

$$\delta l \propto -\langle \delta E \rangle \cdot t \quad l: \text{平均近点離角(時刻に比例)}$$

二体問題のエネルギー

ケプラーの第三法則

平均近点離角と平均運動

$$E \propto -a^{-1}$$

$$n^2 a^3 = \text{const.}$$

$$l \propto nt$$

a : 軌道半長径

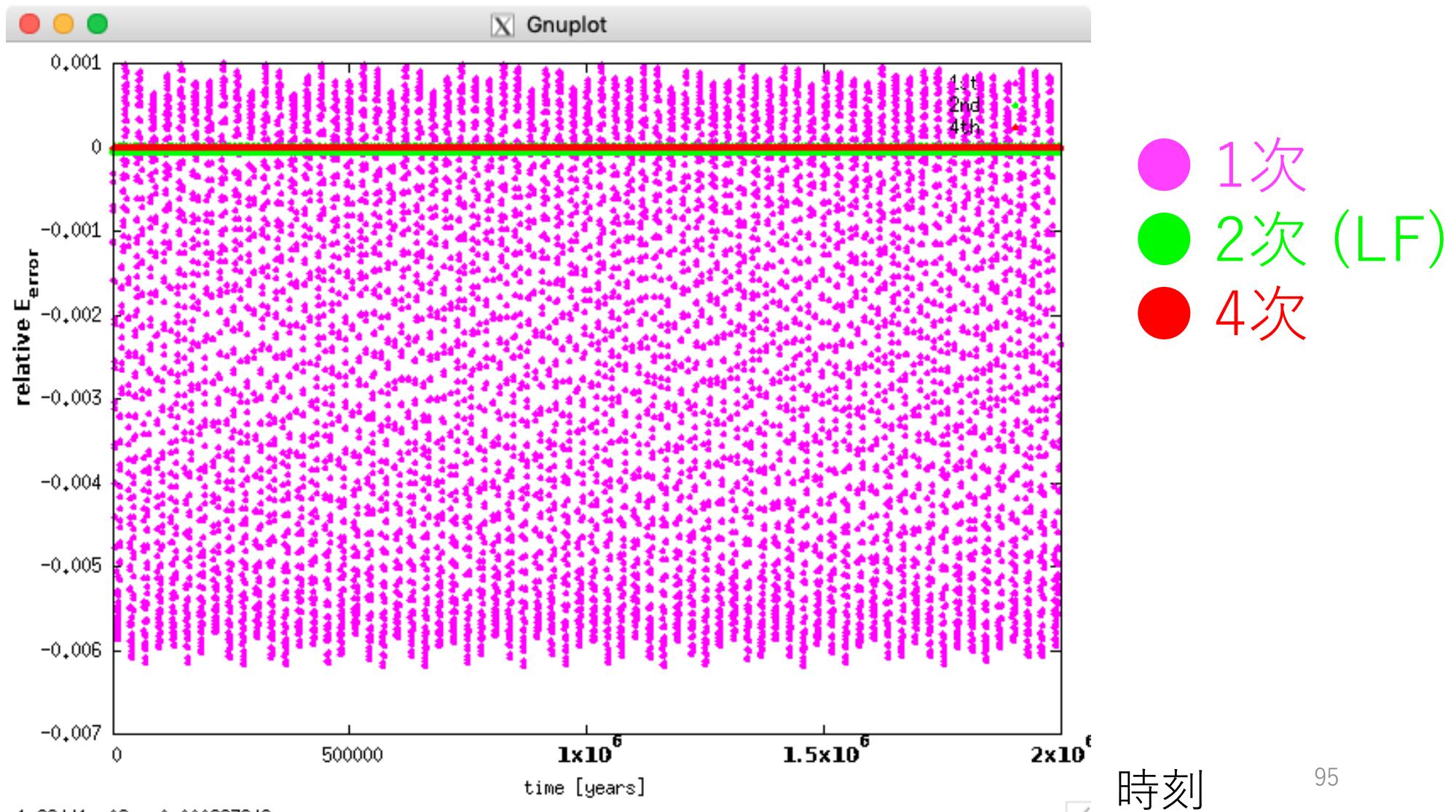
n : 平均運動

- 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)

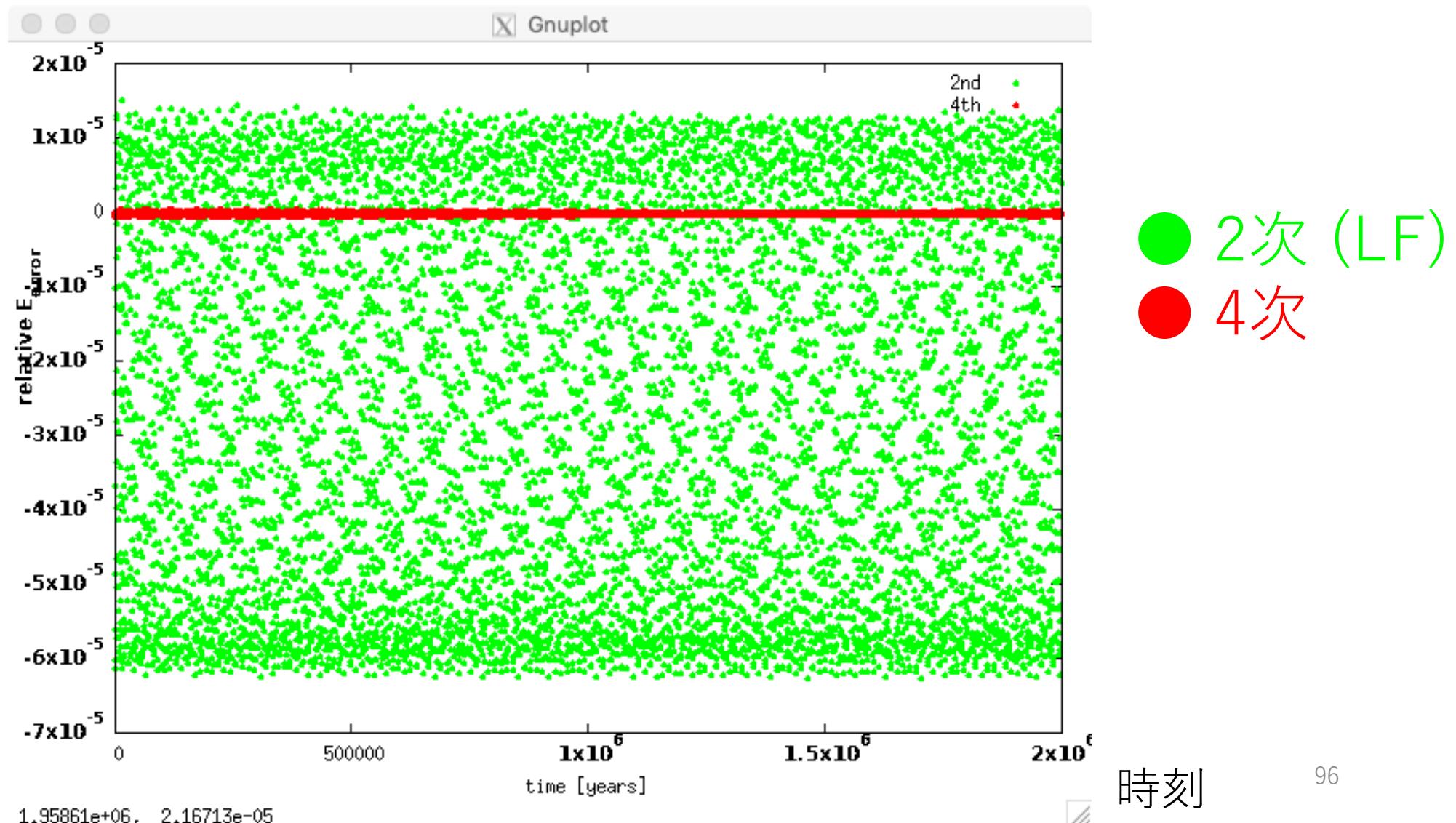
全エネルギーの
相対誤差

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



谷川衝先生からのご質問（2025年2月4日）

- この比較はフェアでないのでは？
高次のスキームを使えば刻み幅を大きくできる可能性があり、
そうすれば計算の総量が減るかもしれない。
- (回答) フェアであるか否かは、何を比較したいかに拠るはず。
ここでは刻み幅 τ を一定とし、その上で各スキームやハミルニア
ン分割方法で誤差がどう変化するかを見ている。
計算の総量を比較する場合にはまた別の方法が必要だろう。

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

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

[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)

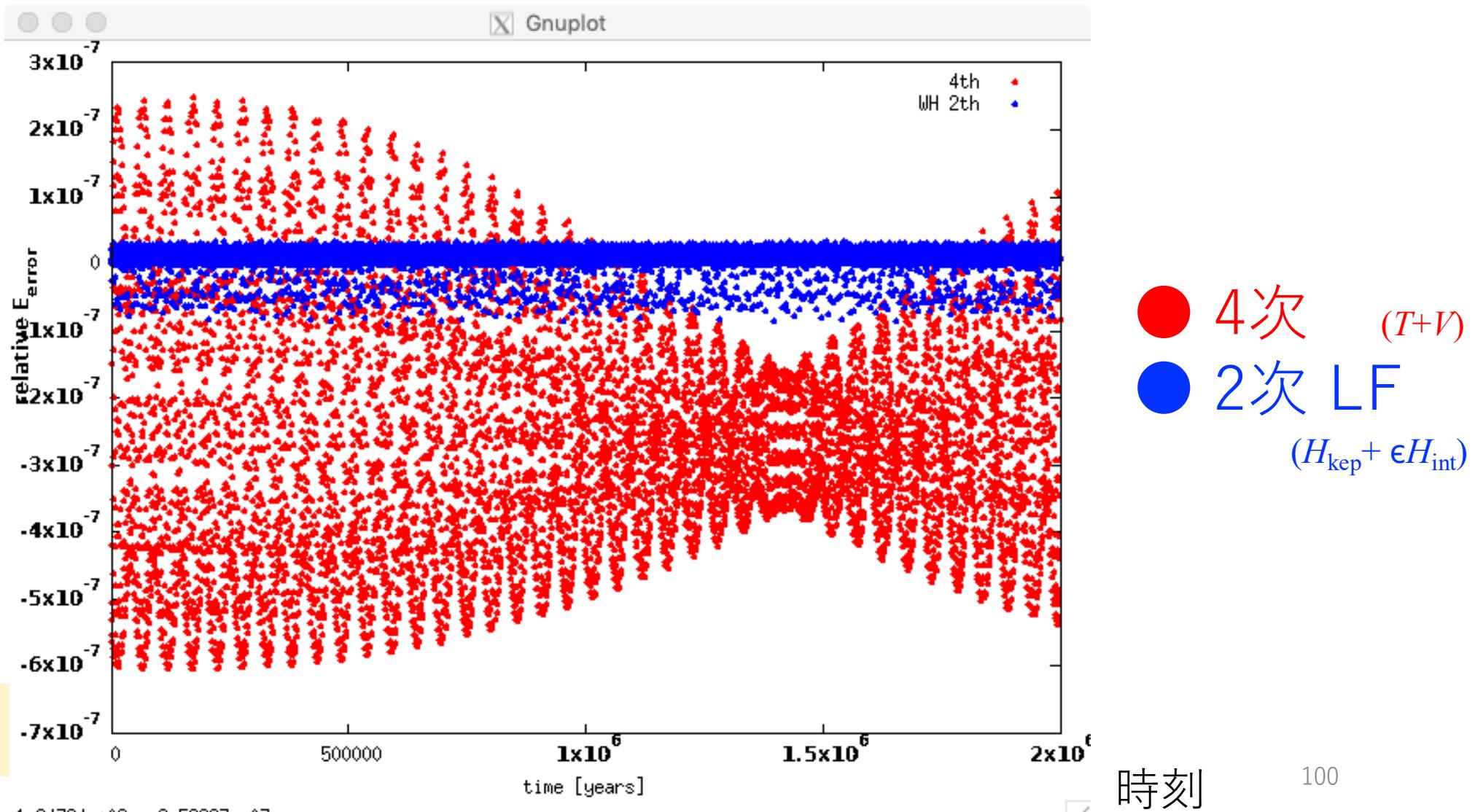
$$H_{\text{error}} = \frac{\epsilon \tau^2}{24} \{ \{ H_0, H_1 \}, H_0 \} + O(\epsilon^2 \tau^2) + O(\tau^4)$$

- 例. 太陽系天体の運動

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

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



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变に保つ要請

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

- 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

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

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

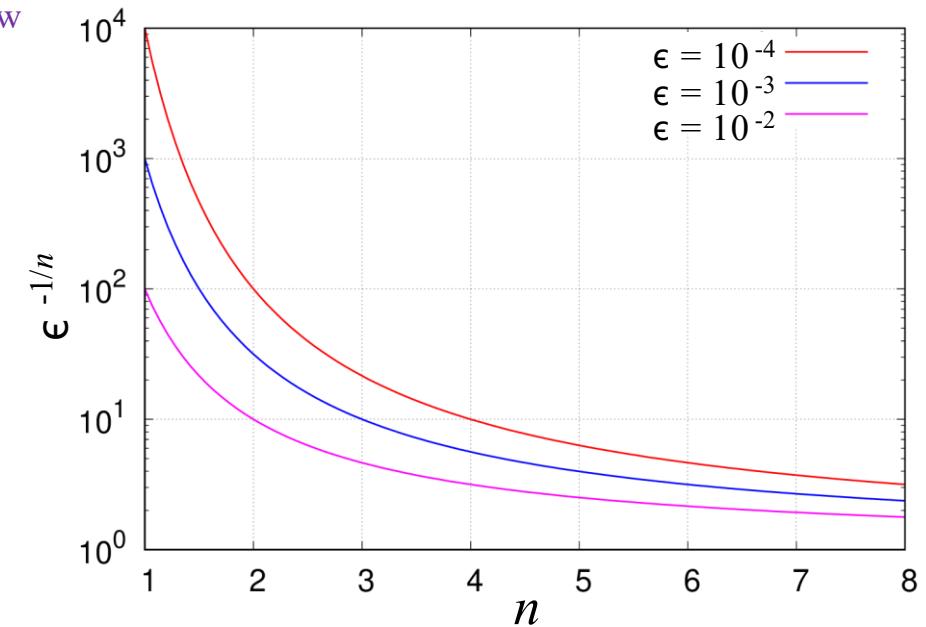
- n 次の場合で同様な要請

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

- 新しい刻み幅

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

➤ 次数 n は小さい方が「お得」



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 $L = |\mathbf{q} \times \mathbf{p}|$
 - $\{L, T\} = \{L, V\} = 0 \rightarrow L$ 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 $E (= H)$
 - $\{E, T\} \neq 0, \{E, V\} \neq 0 \rightarrow E$ は $e^{\tau A}$ と $e^{\tau B}$ に於いて(厳密には)保存されない

N体系全角運動量の厳密な保存

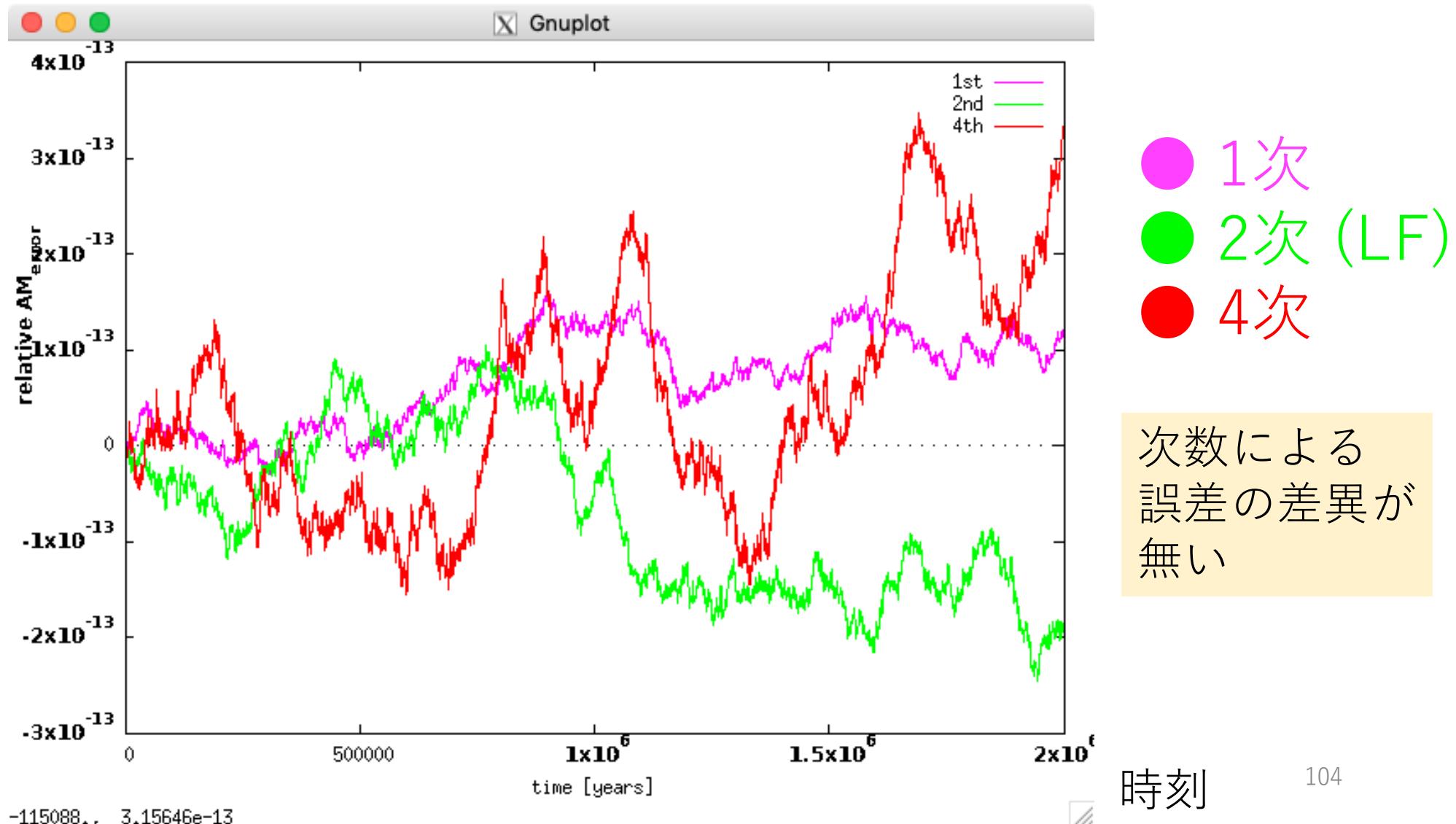
Yoshida (1990, preprint)

(全角運動量 $L = |\mathbf{q} \times \mathbf{p}|$) の具体的な計算

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

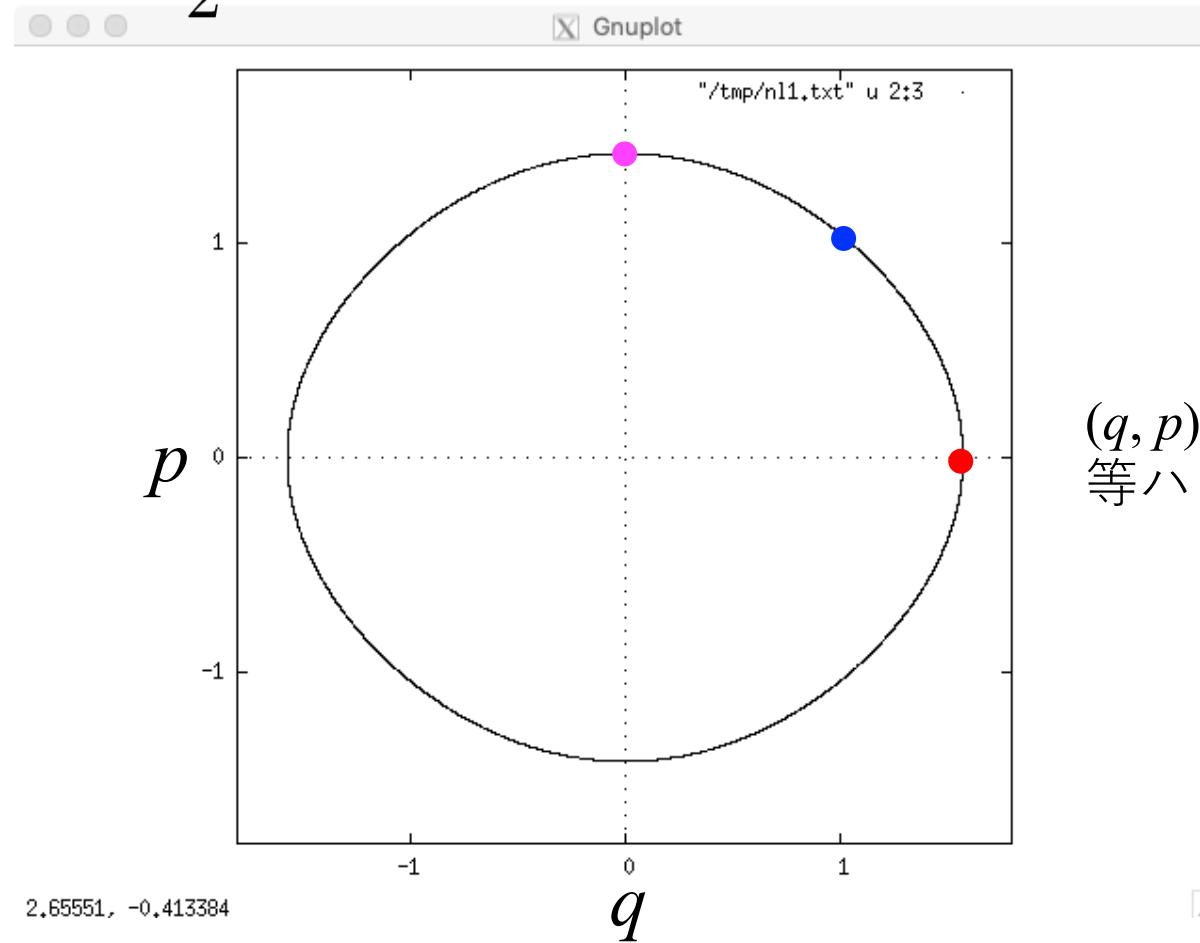
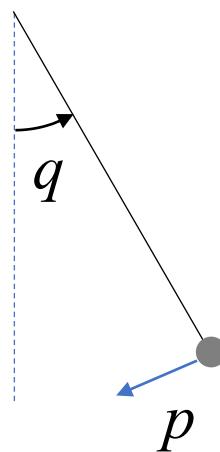
N体の計算例 (N=6, 太陽+木土天海冥)

全角運動量の
相対誤差



初期軌道とエネルギー－誤差

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



(q, p) 平面上に描いた或る等ハミルトニアン(H)線

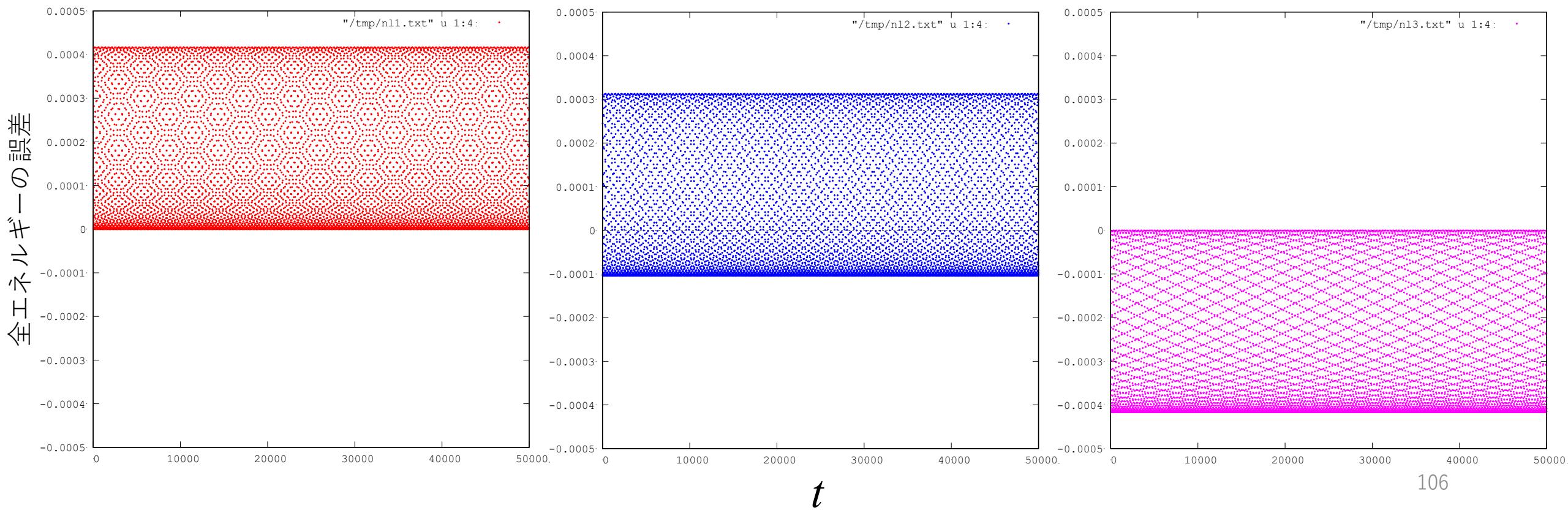
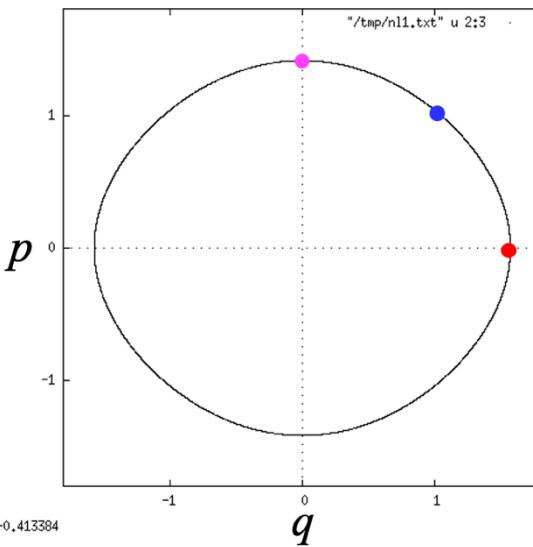
$$(q_0, p_0) = (\pi/2, 0)$$

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

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

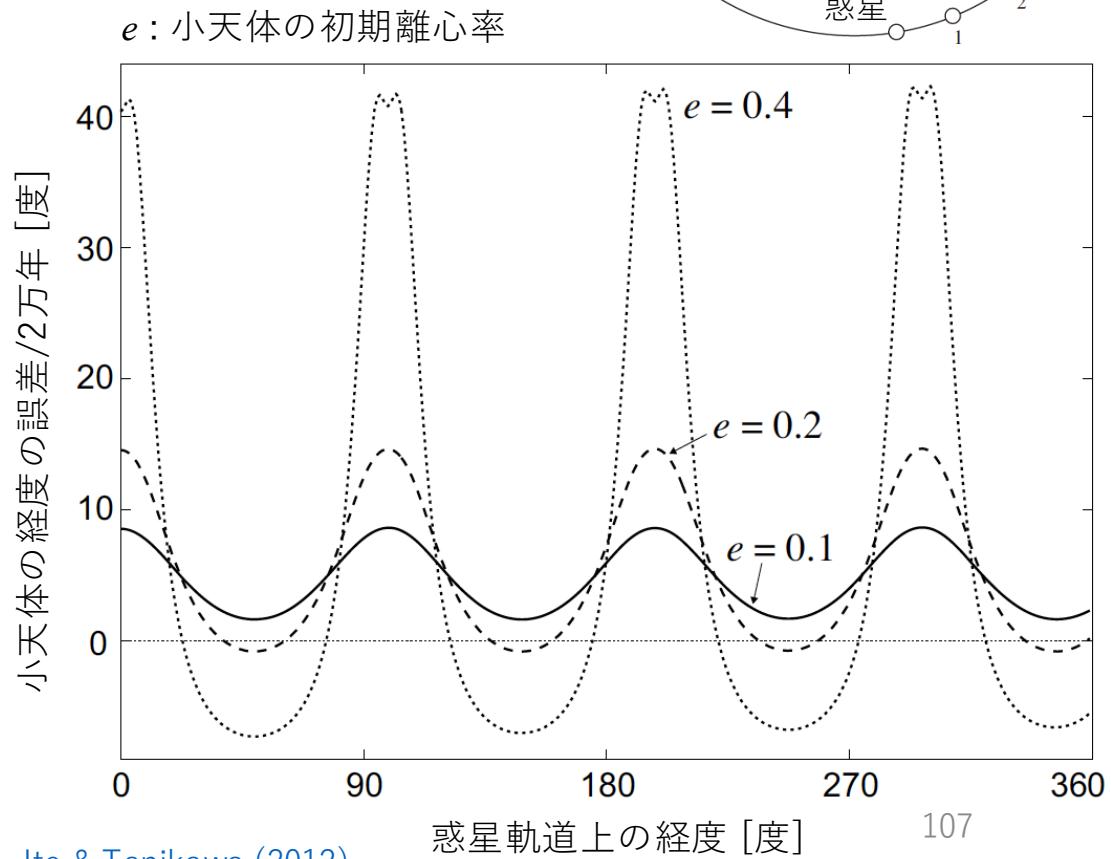
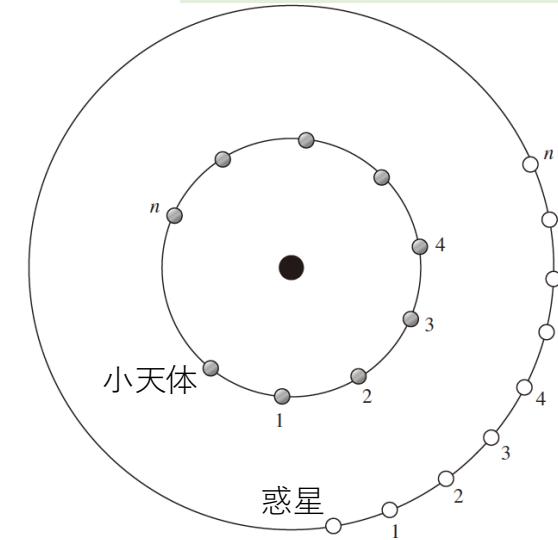
初期軌道とエネルギー誤差

- 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



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



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

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
- 適切なモデルや初期値の検討が更に重要である

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

以下余白