

2021(令和3)年度 N体シミュレーション雨水の学校

常微分方程式の数値解法 の基礎の初歩の触りの一部

2022(令和4)年 2月14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)

話の内容

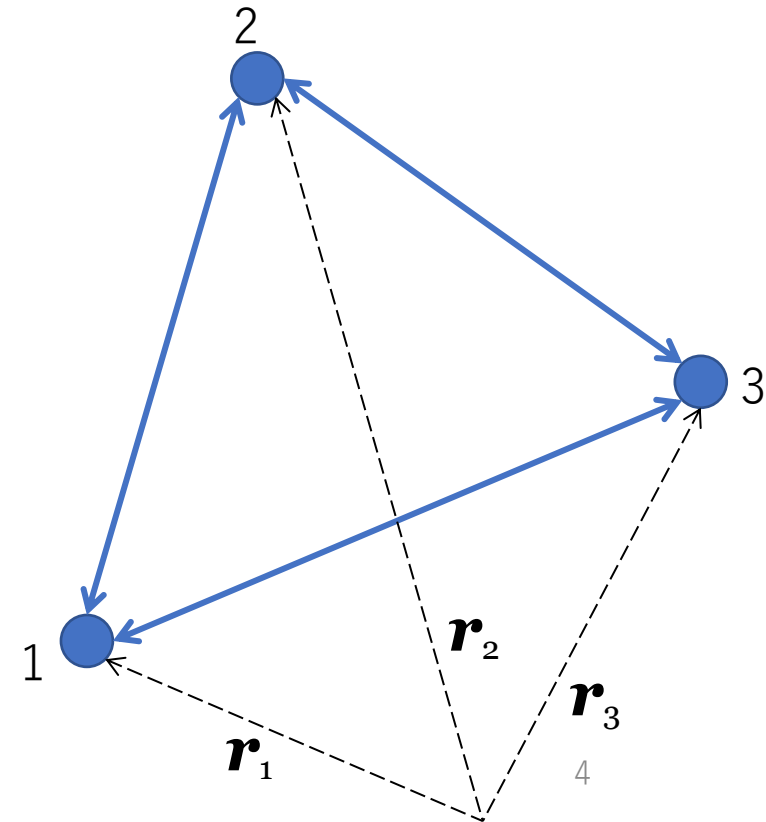
- 一般論と前置き
- 汎用的な解法群
- 正準形式の解法
- 計算例いくつか

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

または
$$\frac{dy}{dx} = f(x, y)$$

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

$x \rightarrow t$ (時刻)なら時間発展

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

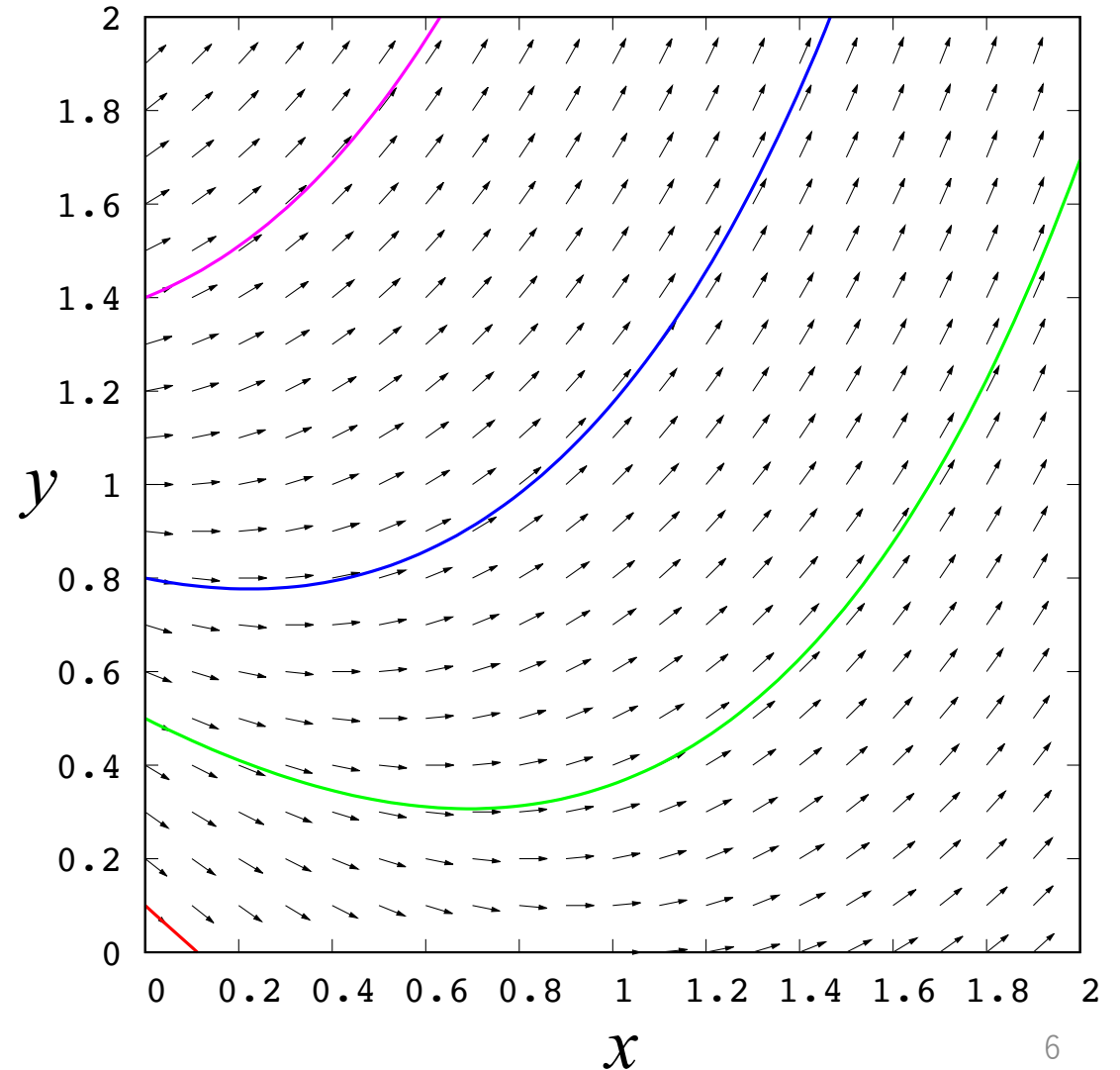
この業界では以下の形で示されることがあり

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

が、これは市販の多くの教科書と整合しない。
今回はあくまで 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



階数の下げ方

- 高階の微係数 $y, y', y'', y''', \dots, y^{(n)}$ を含む常微分方程式
 - $y^{(n)} = f(x; y, y', y'', y''', \dots, y^{(n-1)})$
- 0階, 1階, \dots , $n-1$ 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した微分方程式
 - $y'_{n-1} = f(x; y_0, y_1, y_2, \dots, y_{n-1})$ ← y_{n-1} に関する一階の常微分方程式
 - $y'_{n-2} = y_{n-1}$ ← y_{n-2} に関する一階の常微分方程式
 - \vdots
 - $y'_1 = y_2$
 - $y'_0 = y_1$
 - 一本の n 階の常微分方程式 → 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

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

以下の連立一階常微分方程式に変換し、解く

$$\begin{cases} y_2' = -3y_0y_2, \\ y_1' = y_2, \\ y_0' = y_1 \end{cases}$$

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

重力N体問題では

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

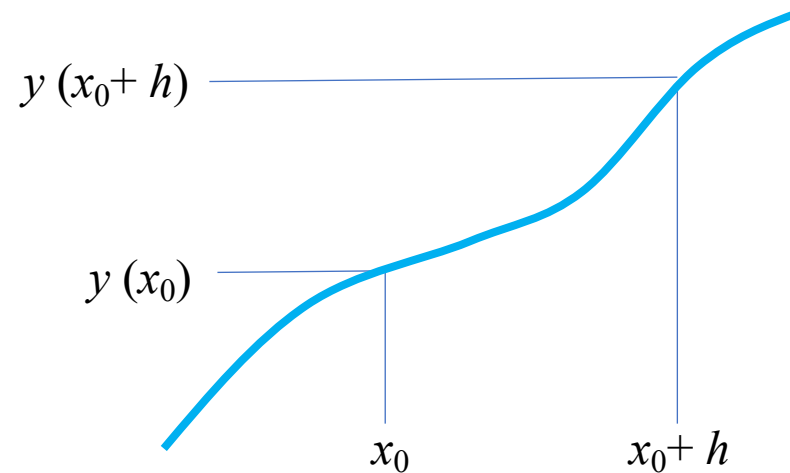
$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d\mathbf{v}}{dt} = f(t; \mathbf{r}), \\ \frac{d\mathbf{r}}{dt} = \mathbf{v} \end{array} \right.$$

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

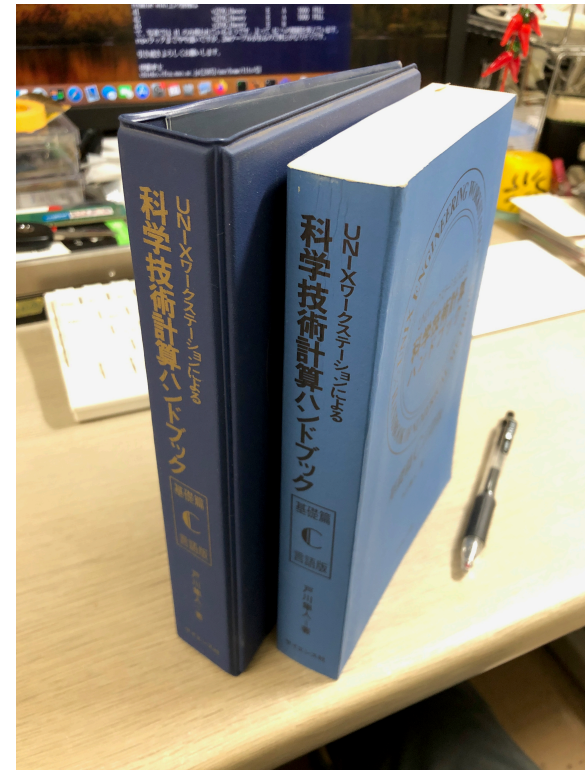
$$y(x_0 + h) = y(x_0) + \int_{x_0}^{x_0+h} f(x, y(x)) dx$$



汎用的な解法群

汎用的な解法群

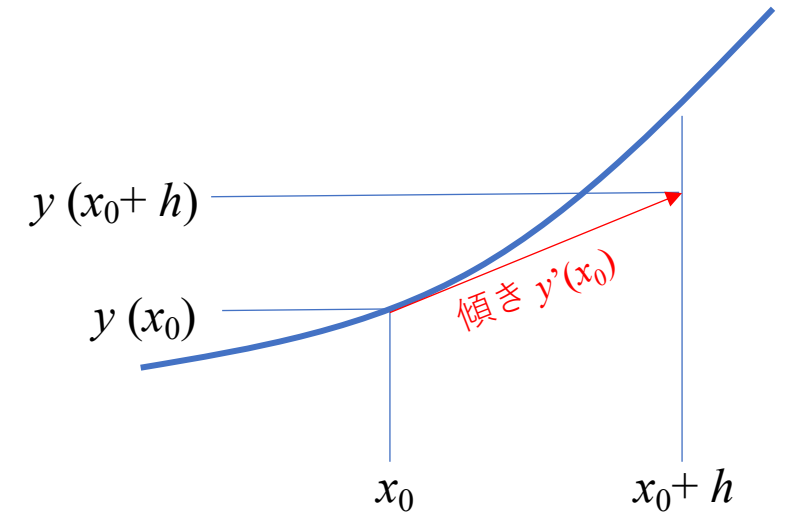
- 長い研究史があり、多くの成果があり、とても奥深い
 - Euler法
 - Runge-Kutta法
 - 多段法、予測子・修正子法
 - 陽解法と陰解法
 - :
- この講義(前半部)が沿う書籍
- N体学校の過去の講義録も参照



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

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

「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

- $O(h^2)$

$x = a$ から $x = b$ をステップ h で進む

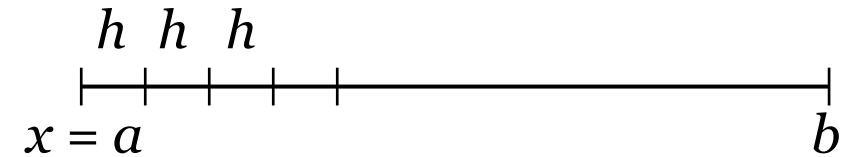
- ステップの総数 = $(b-a) / h$

全ステップで発生する誤差

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

→ オイラー法の精度は一次 $O(h^1)$

- 「次数」 = order (時に degree)



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)))
  }
}
```

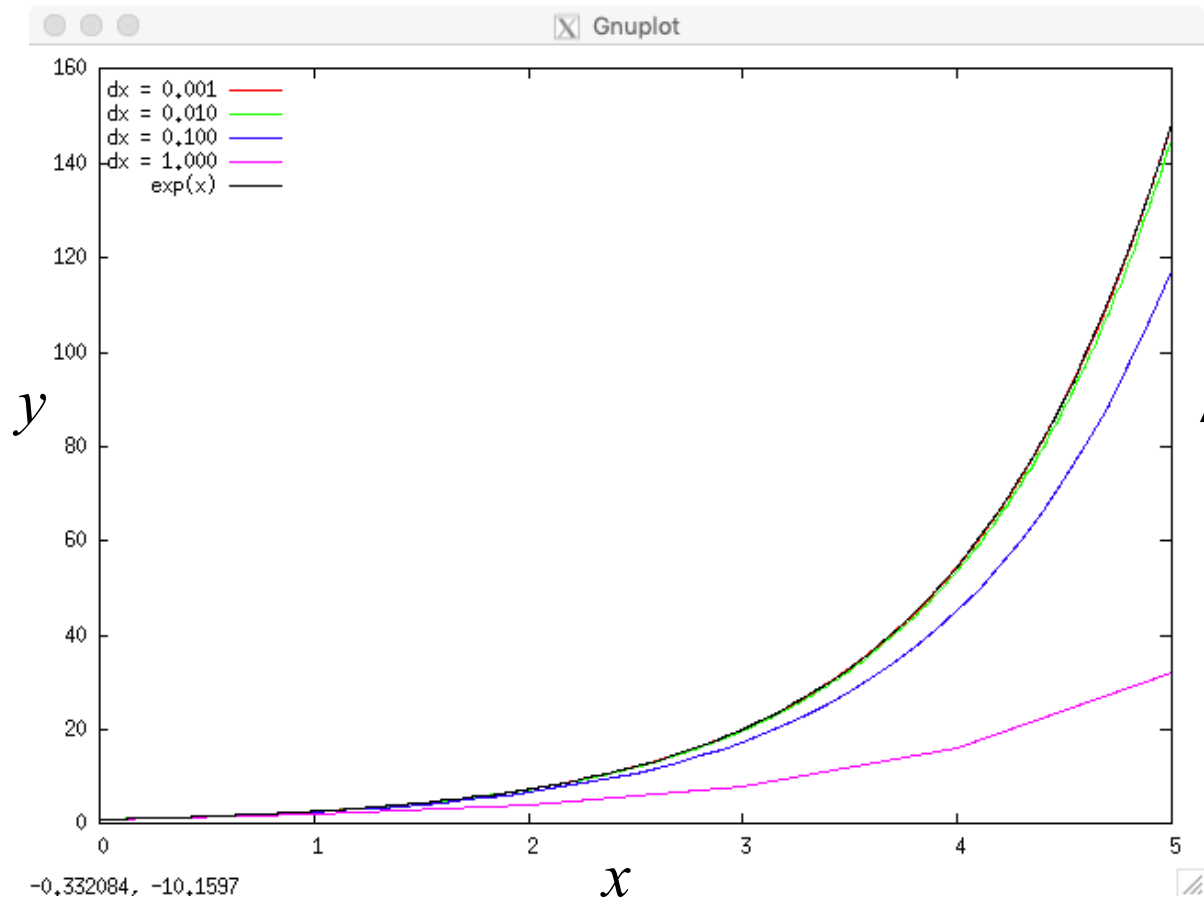
```
# y' = dy/dx = f(x,y)
function fxy(x,y){
  return y
}

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

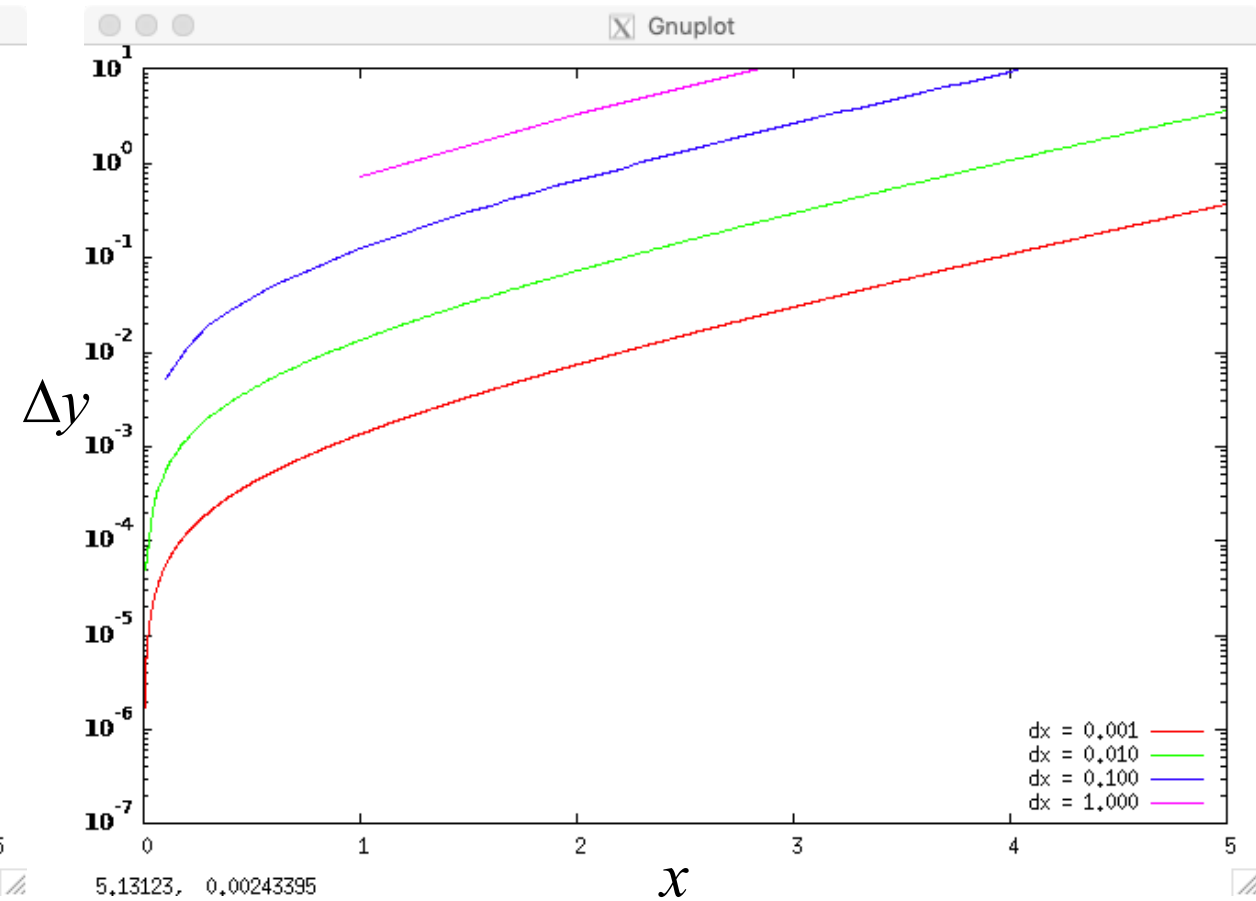
# absolute value
function fabs(x){
  if (x >= 0) return x
  else      return -x
}
```

実例

$y = e^x$ との比較



$y = e^x$ との差分

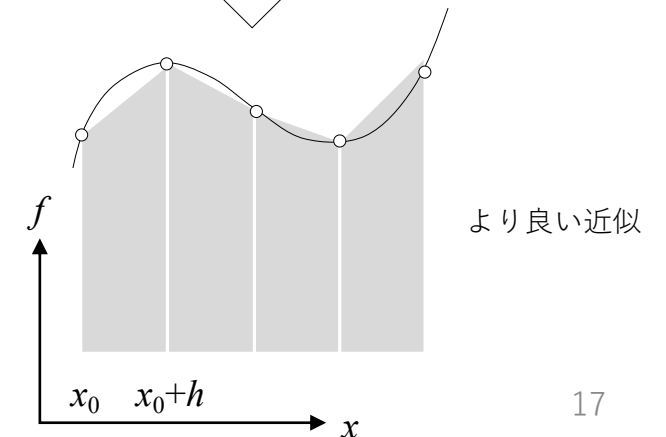
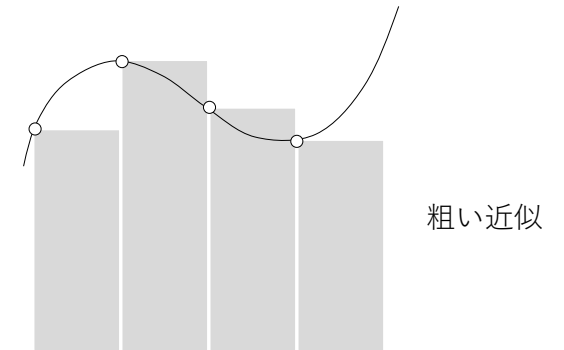


(一般論) 数値計算の誤差

- 物理法則の表現 → 連続関数
- だが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
 - 曲線的な図形を四角形で近似する
 - :
- 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

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

無限級数を打ち切る



(一般論) 数値計算の誤差

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値しか表現できない

- 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
- :

(一般論) 数値計算の誤差

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
- 近い数値で代表させる \rightarrow 「丸める」 \rightarrow 丸め誤差

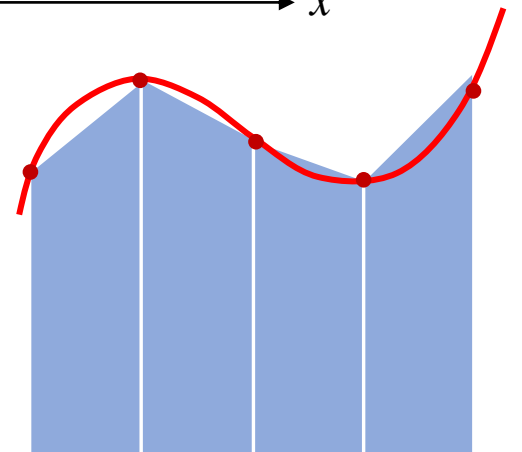
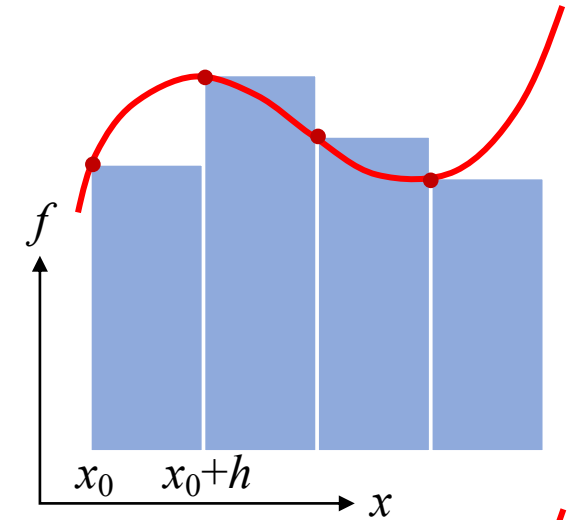
(オイラー法) 精度の向上

- 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

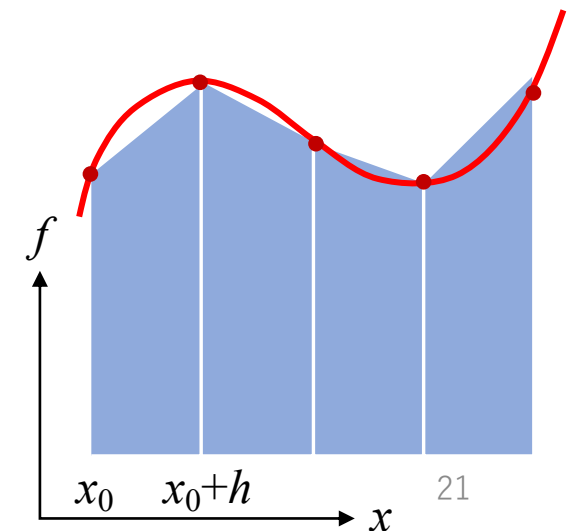
$$\overline{y(x_0 + h)} = y(x_0) + hf(x_0, y(x_0)) \quad \leftarrow y(x_0 + h) \text{ の予想値 (オイラー法)}$$

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

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 $\rightarrow O(h^3)$
- 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 $O(h^2)$



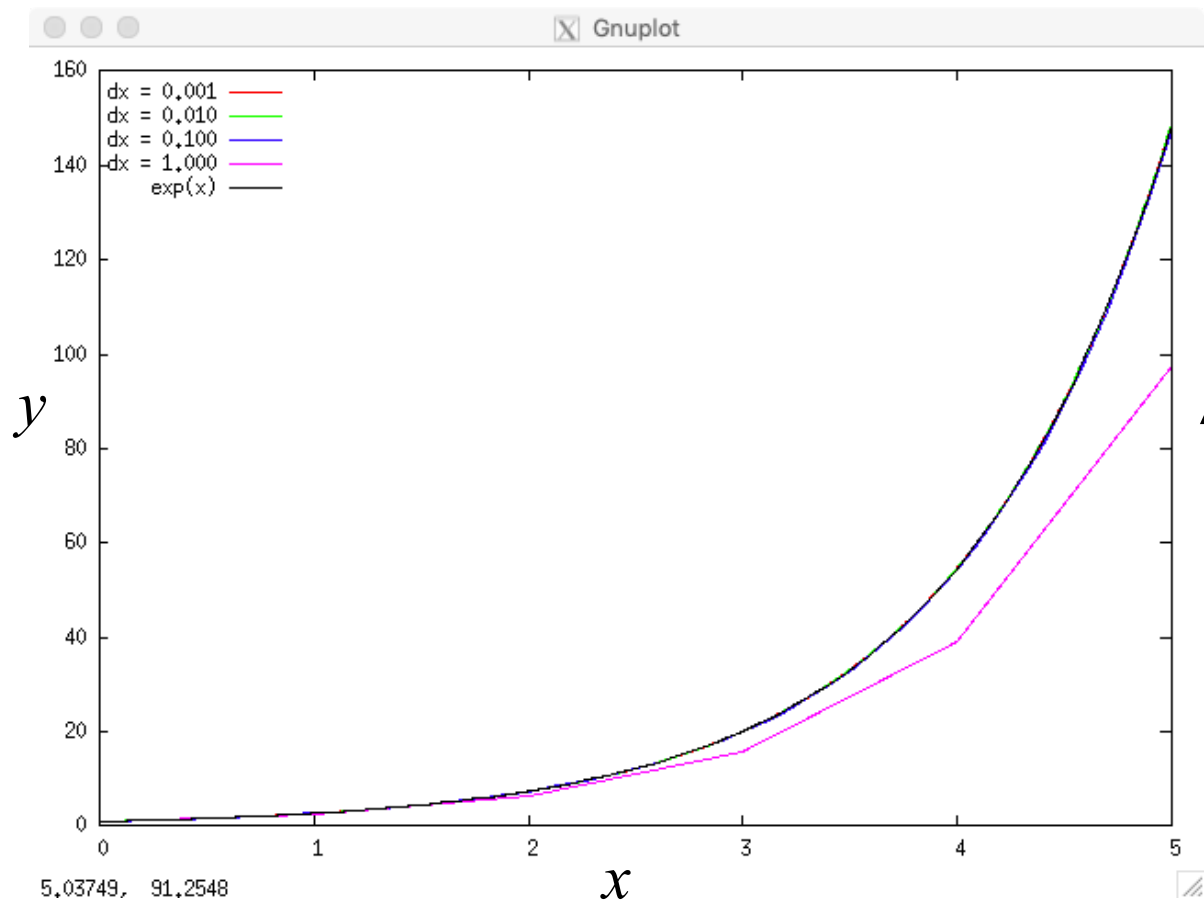
(オイラー法) 精度の向上

```
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)
}

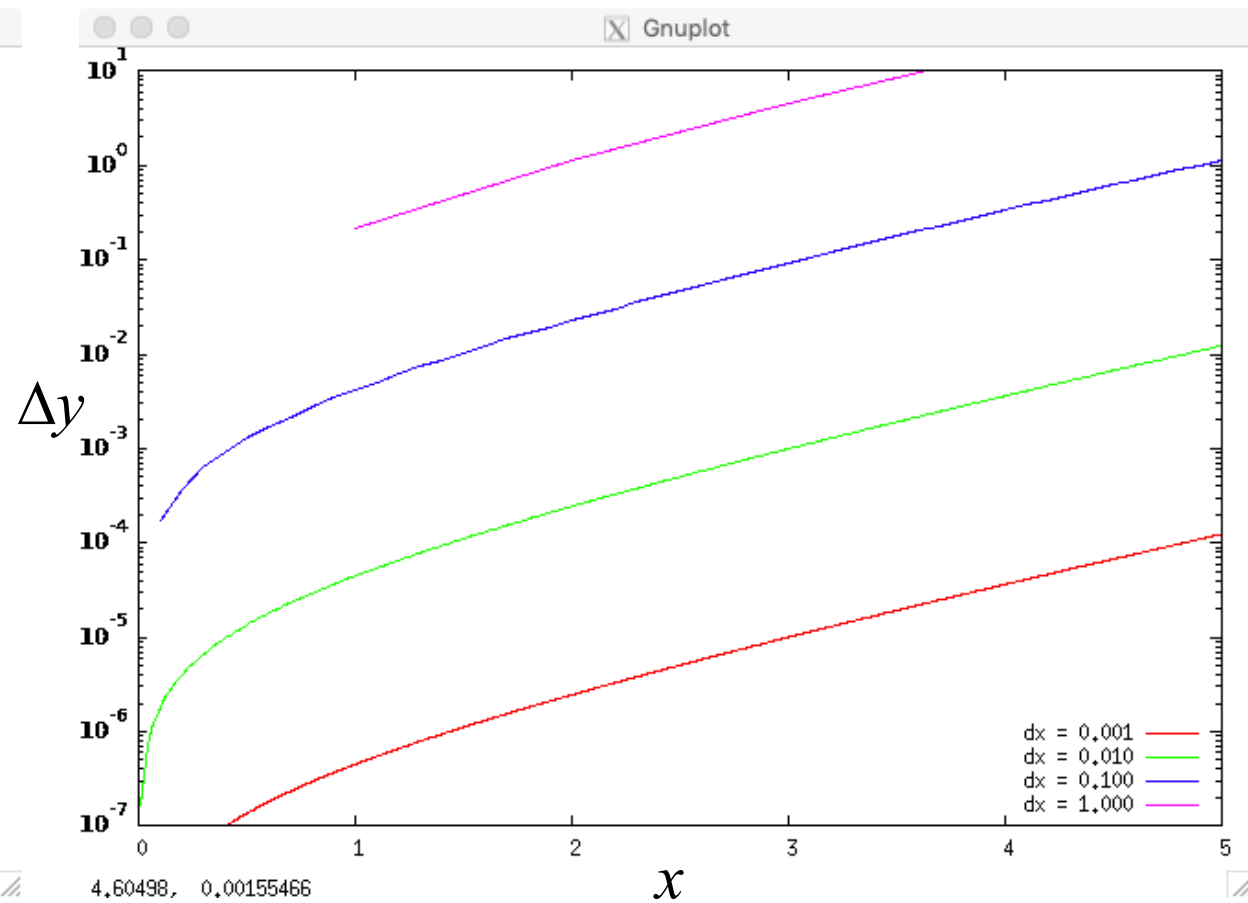
{
  x = x0
  y = y0
  while (x < xmax){
    yeu = y + fxy(x,y)*dx           # Euler
    y  += dx * (fxy(x,y) + fxy(x+dx,yeu))/2 # Trapezoid
    x  += dx
    printf("%e %e %e\n", x, y, fabs(y-yas(x)))
  }
}
```

(オイラー法) 精度の向上

$y = e^x$ との比較

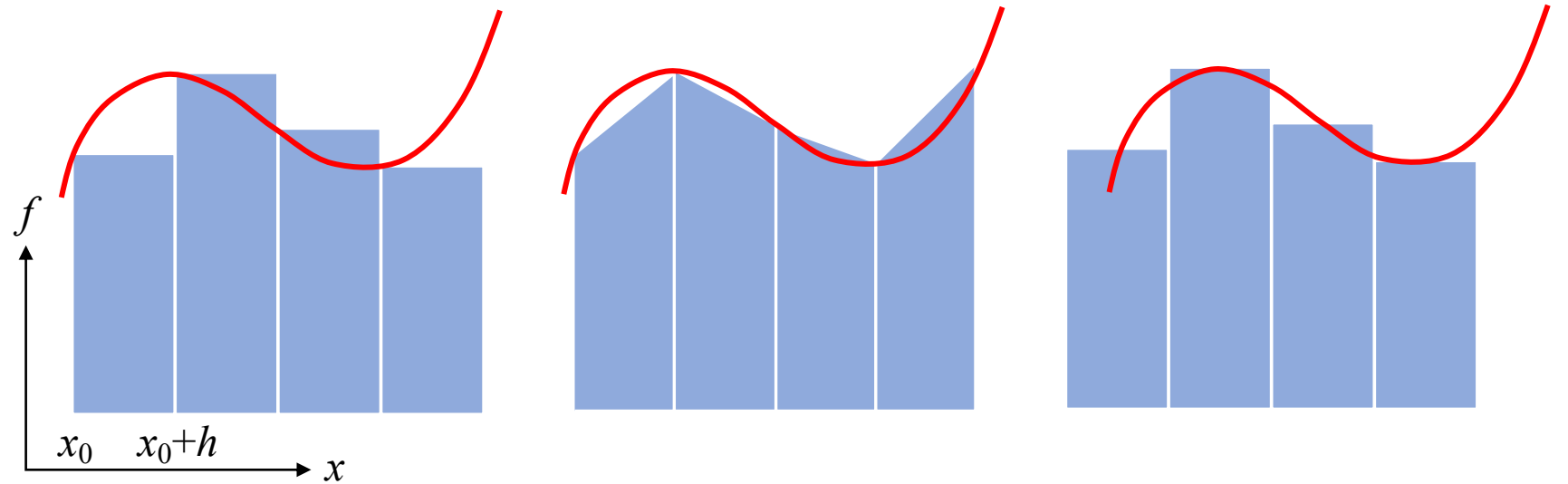


$y = e^x$ との差分



(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

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

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

- 4次の精度 $O(h^4)$
- 段数 = step

一般化の例 (4段)

$$d_0 = hf(x_0, y(x_0)),$$

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

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

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

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

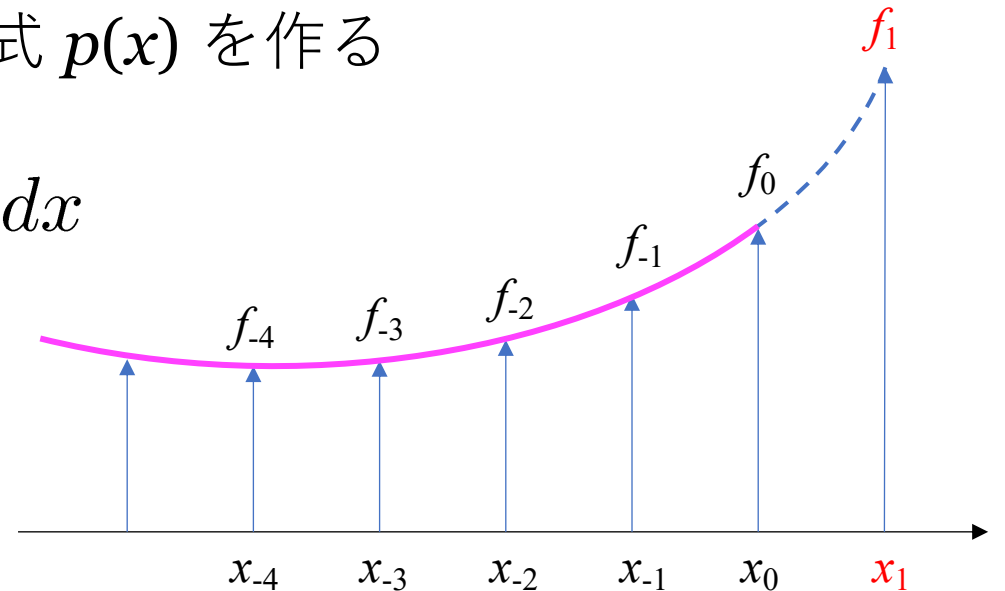
- これを $y(x_0+h)$ のテイラー展開と比較する
- h^4 項まで一致するように $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \beta_{10}, \dots, \gamma_0, \dots, \gamma_3$ を定める
 - 変数の数 > 方程式の数
 - 公式は唯一には決まらない

多段法 (考え方のみ)

- n段(n回の関数 f 計算)が必要な理由
 - n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. $f_0, f_{-1}, f_{-2}, \dots$ を使いn次の近似多項式 $p(x)$ を作る

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

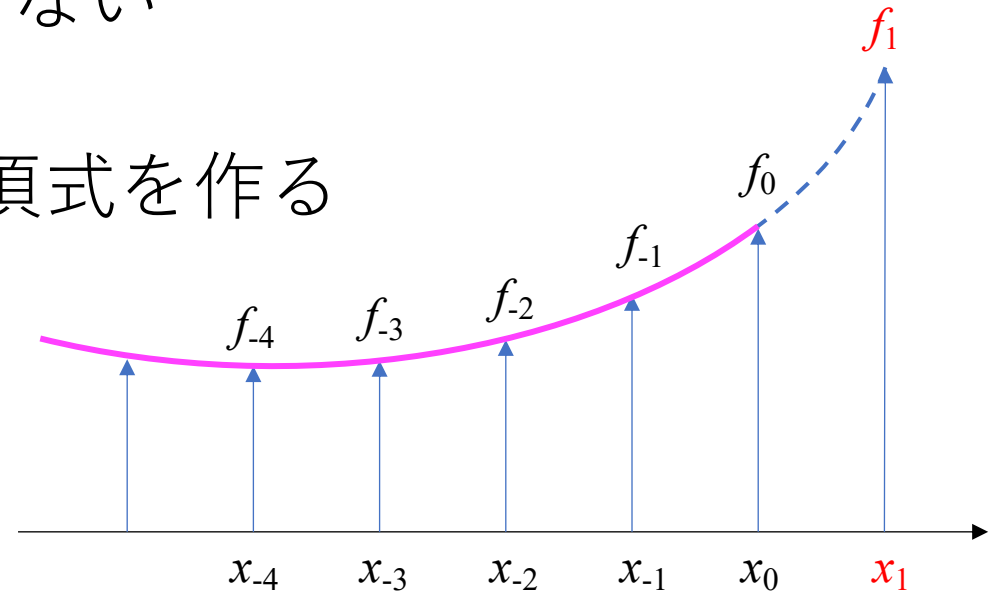
- 段数 = step



多段法（考え方のみ）

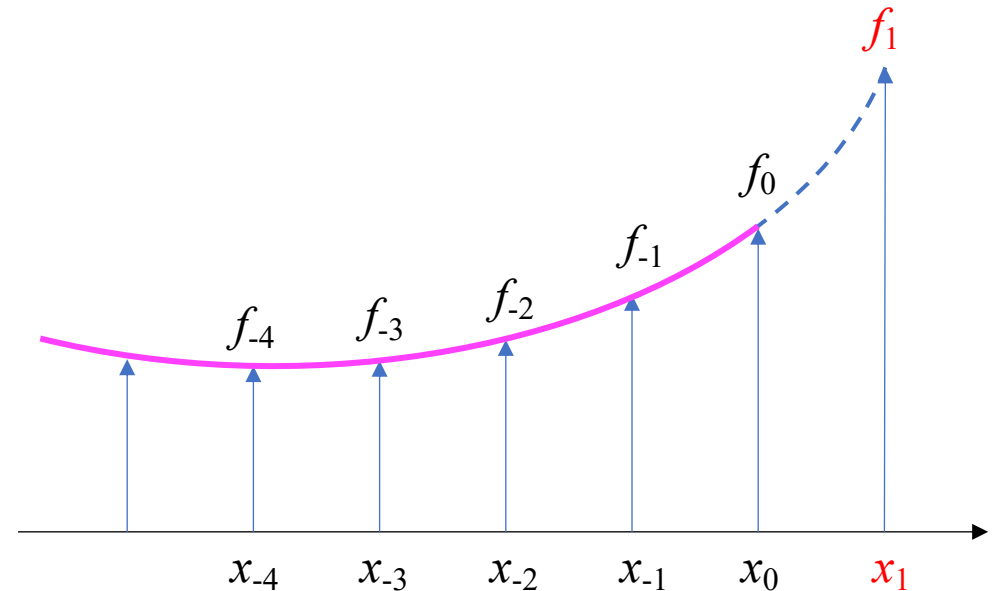
- 滑らかな関数であれば高い精度を得られる
- だが、出発値を揃えるのが面倒
- 単なる外挿では安定した積分ができない
 - 例. Adams-Bashforth公式
- 対策: $f_1, f_0, f_{-1}, f_{-2}, \dots$ を使い近似多項式を作る
 - 何らかの予測 → 補間 → 修正
 - 例. Adams-Moulton公式

「予測子・修正子法」



多段法（考え方のみ）

- が、出発値の準備の面倒さは避け得ない
- 過去の値ではなく、高階の導関数を使って多項式近似しては？
 - 例. エルミート法 [Makino \(1991\)](#) など
 - 詳しい解説 → 小久保先生の講義

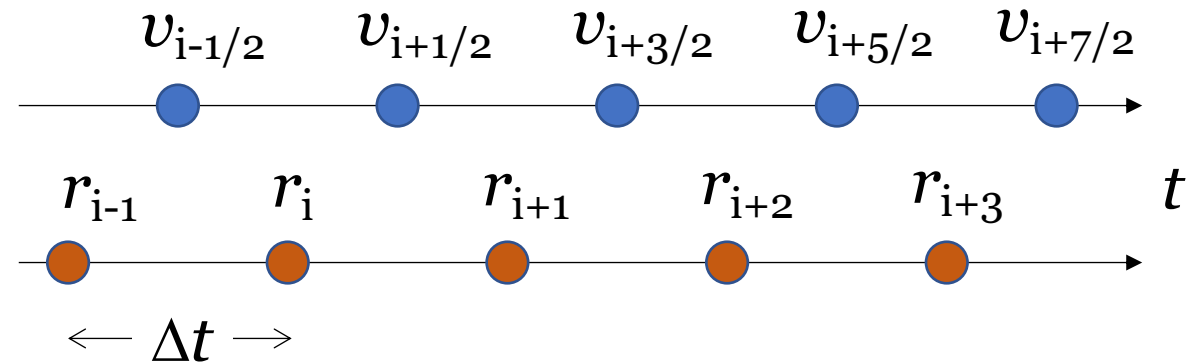


唐突だが、二階の常微分方程式

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

に関し、以下の方法は良い。

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



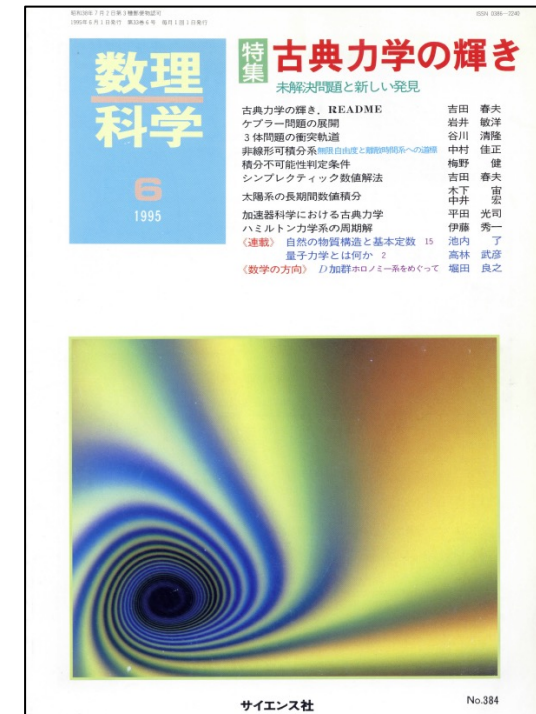
- 様々な記法・名称あり
 - [Leapfrog \(LF\)](#), velocity Verlet法 など
- 小久保先生の講義+実習で体験
 - 本講の後半はこれの概要説明

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

- この講義(後半部)が沿う解説記事
 - 膨大な数の文献がある。日本語でも



復習

- (重力)N体問題 → 多くは正準形式で記述できる
- 一般化座標 q , 一般化運動量 p
- 正準形の運動方程式

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

- ハミルトニアン

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

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

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

- ポアソン括弧 $\{, \}$

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

復習

- ハミルトン系の時間発展
$$\begin{pmatrix} \mathbf{q}(0) \\ \mathbf{p}(0) \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} \mathbf{q}(\tau) \\ \mathbf{p}(\tau) \end{pmatrix}$$
- これを座標変換と見做す \rightarrow 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
 - \vdots
- この性質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 $\{, J\}$

$$\{, J\} F \equiv \{F, J\}$$

- $\{, J\}$ の指数関数(写像)

$$\begin{aligned} e^{\tau\{, J\}} &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(\tau\{, J\})^k}{k!} \\ &= I + \frac{\tau\{, J\}}{1!} + \frac{\tau^2\{\{, J\}, J\}}{2!} + \frac{\tau^3\{\{\{, J\}, J\}, J\}}{3!} \\ &\quad + \dots \end{aligned}$$

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

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

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

- これを以下と見做す

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

- 形式的な解

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

形式的な解

- ハミルトニアン分割 (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
$$\begin{aligned} z(\tau) &= e^{\tau\{, H\}} z(0) \\ &= e^{\tau\{, T+V\}} z(0) \\ &= e^{(\tau\{, T\} + \tau\{, V\})} z(0) \\ &= e^{\tau(A+B)} z(0) \end{aligned}$$

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

形式的な解

- 以下の操作(演算)では厳密な解が求まる

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

- $e^{\tau A}$ の式を通常のに書き下す

$$\frac{dq}{dt} = \frac{\partial T(p)}{\partial p}, \quad \frac{dp}{dt} = -\frac{\partial T(p)}{\partial q}$$

- $p = \text{定数}, q \propto t \rightarrow$ 等速直線運動
- $e^{\tau B}$ の式も同様
 - $q = \text{定数}, p \propto t \rightarrow$ 等速直線運動
- これらの操作(演算)をうまく組み合わせたい

形式的な解

- 真の時間発展 $e^{\tau(A+B)}$ を展開

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

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

- 実際に計算できるのは

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

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

- $O(\tau)$ まで合致

一次のスキーム

- $e^{\tau A} e^{\tau B}$ を通常形式で書き下す

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

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

シンプレクティック数値解法
(一次)

一次のスキーム

- オイラー法でこの計算をすると

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

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

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

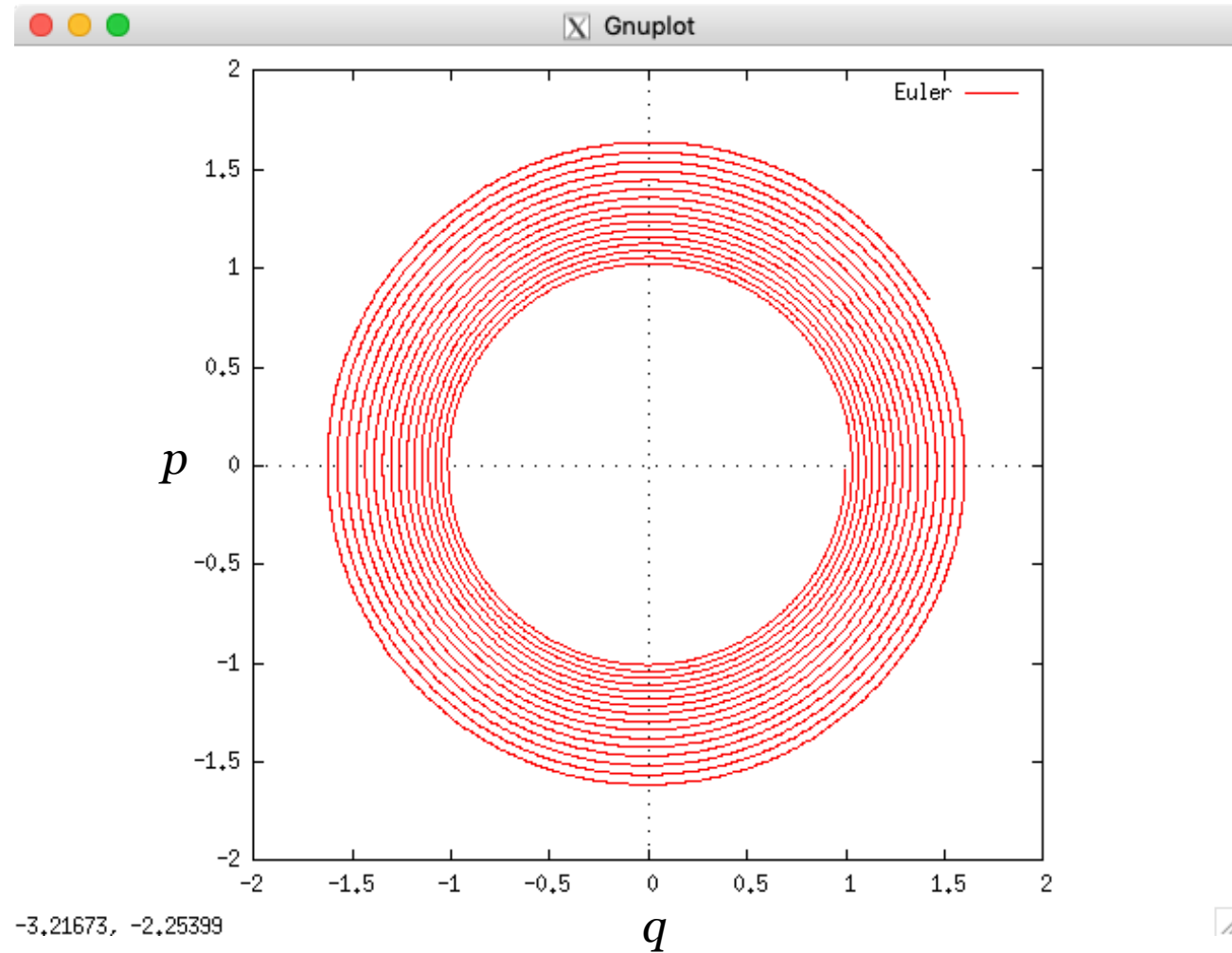
$$\frac{dq}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p} = p, \quad \frac{dp}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q} = -q$$

厳密解（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 (シンプレクティック数値解法)

```
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

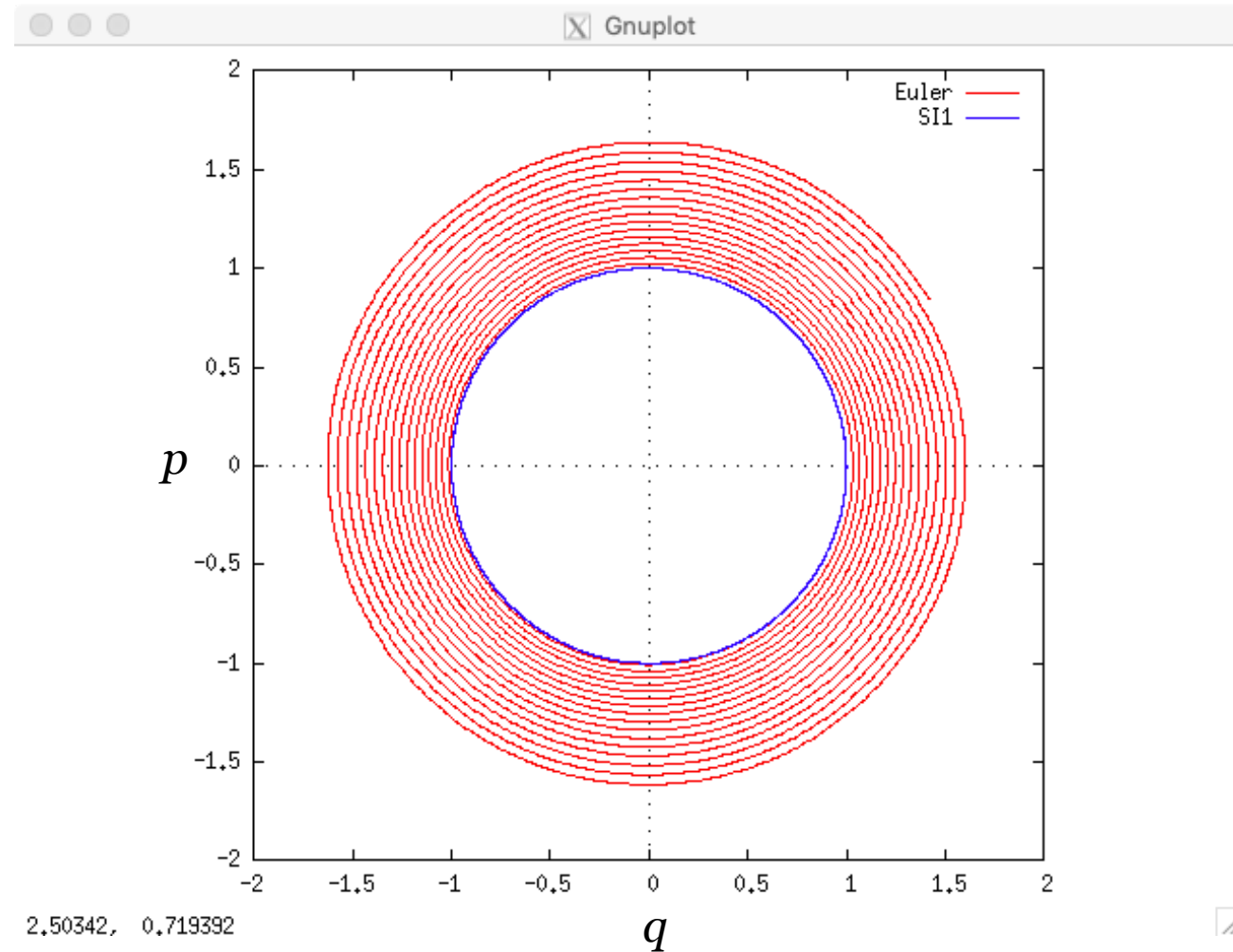
$$\frac{dq}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p} = p, \quad \frac{dp}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q} = -q$$

厳密解 (回転)

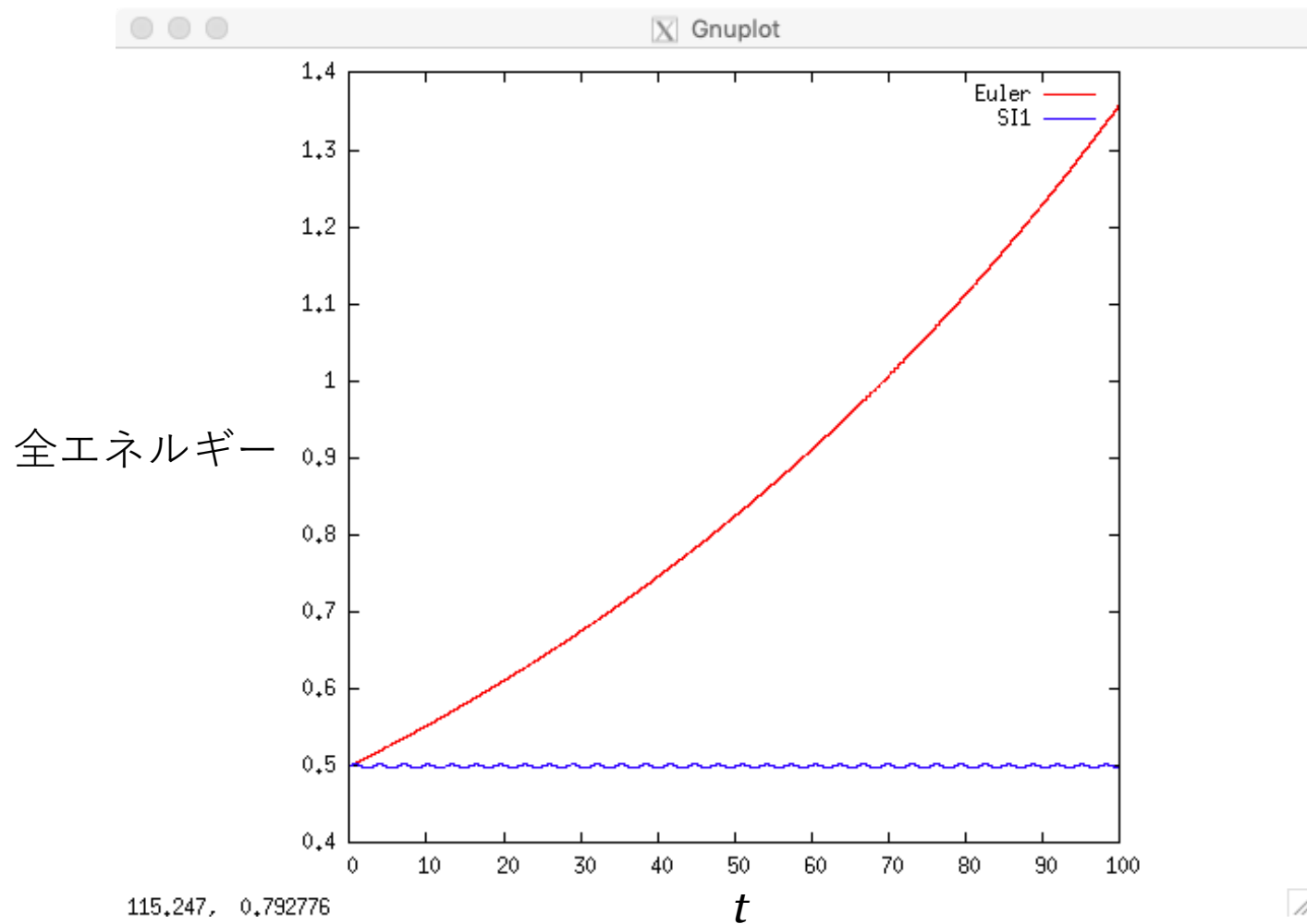
$$\begin{pmatrix} q(\tau) \\ p(\tau) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \tau & \sin \tau \\ -\sin \tau & \cos \tau \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q(0) \\ p(0) \end{pmatrix}$$

調和振動子（シンプレクティック数値解法）

- 発散しない



全エネルギーの保存状態



違いは少しだけ

オイラー法のコードで以下の部分

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

を書き誤り、以下

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

のようにするとシンプレクティック数値解法になる

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

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 $\rightarrow [X, Y] = 0$

$$Z = X + Y$$

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

CBHD公式 (以前はBCH公式とも)

Campbell, Baker, Hausdorff, and Dynkin

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

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

- 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

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

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

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

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

τ で両辺を割ってある

Jacobiの恒等式を使う

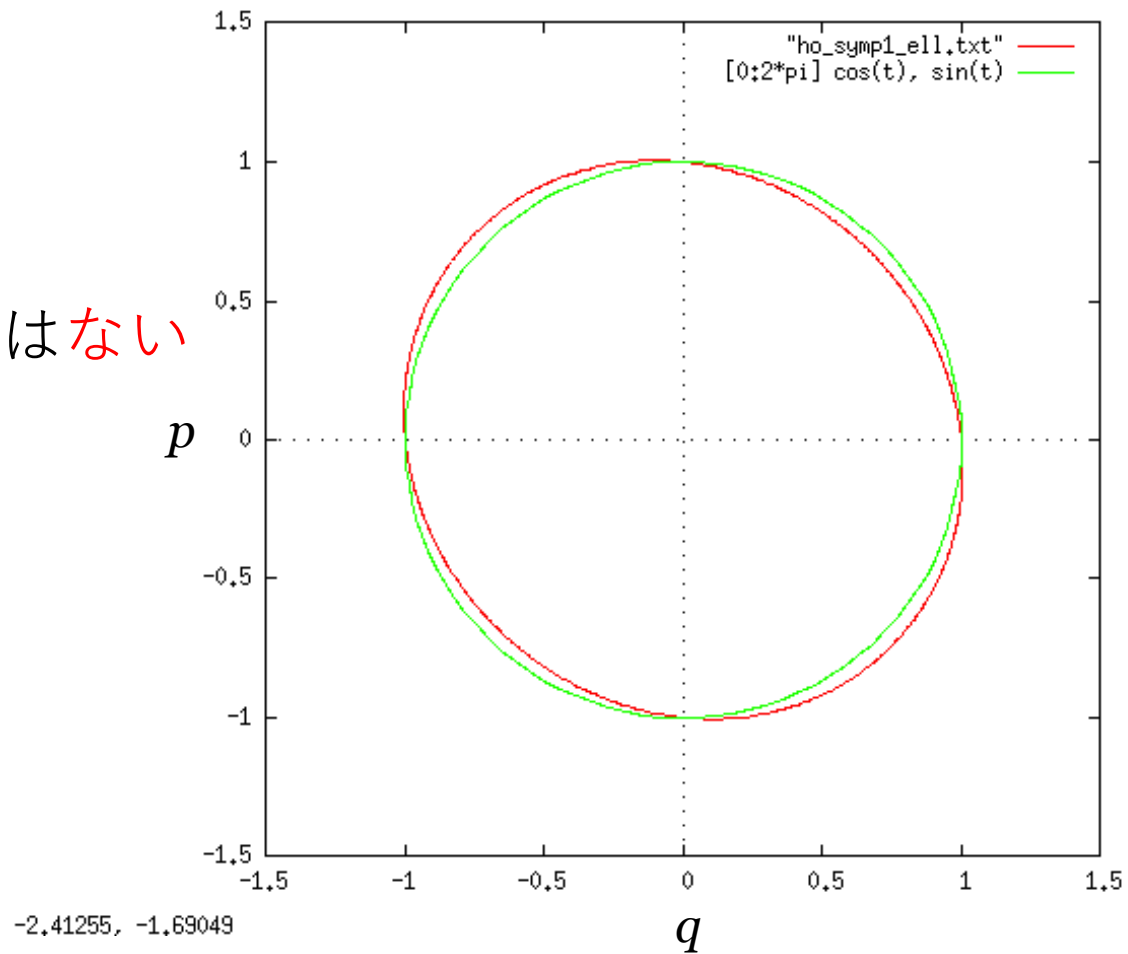
$$\begin{aligned} \{f, \{V, T\}\} + \{V, \{T, f\}\} \\ + \{T, \{f, V\}\} = 0 \end{aligned}$$

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
シンプレクティック性を示すのではない



精度の向上

- 高次スキームの一般形

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

- 以下の各々を代入

$$e^{\tau A} = 1 + \frac{\tau A}{1!} + \frac{\tau^2 A^2}{2!} + \dots, \quad e^{\tau B} = 1 + \frac{\tau B}{1!} + \dots,$$

- $A, B, A^2, AB, BA, B^2, \dots$ 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                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)

$$c_1 = c_2 = \frac{1}{2}, d_1 = 1, d_2 = 0 (k = 2)$$

二次の方法

形式的に書けば

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

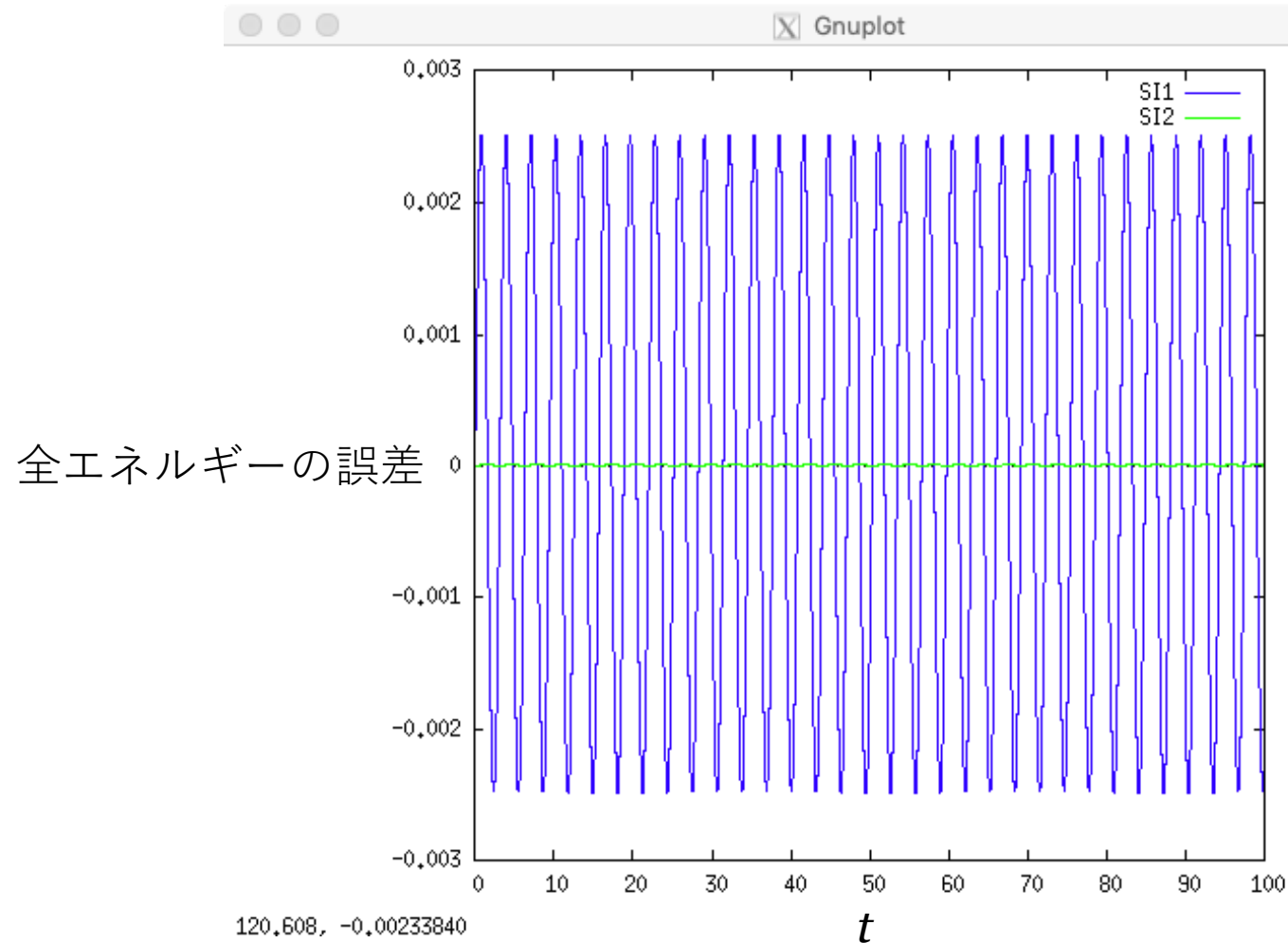
実際的な書き方

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

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）



一次
二次 (Leapfrog)

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)

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

- ハミルトニアン \tilde{H}

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

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

- 元々のハミルトニアンとの差異は $O(\tau^2)$ に留まる

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

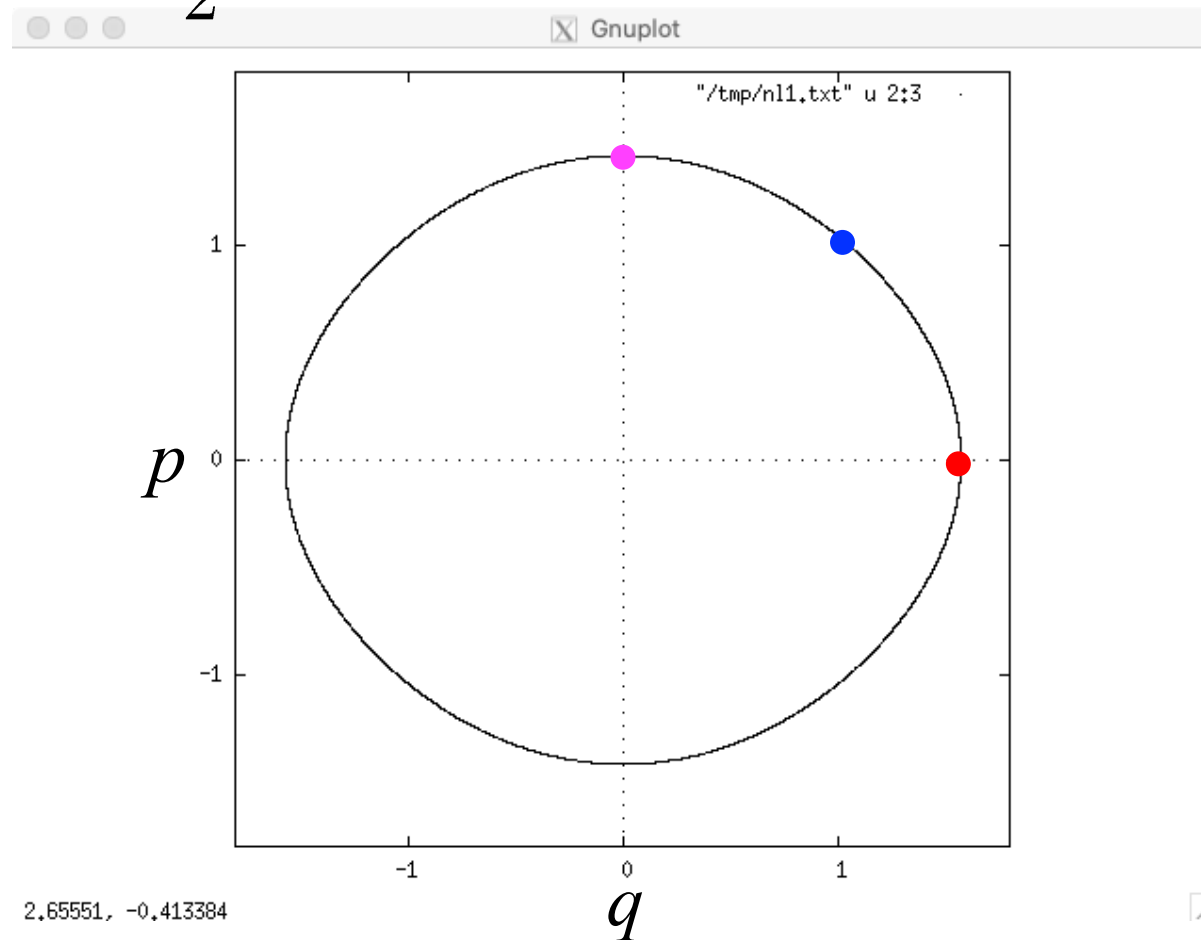
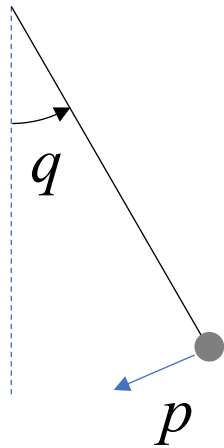
$$c_1 = c_4 = \frac{1}{2\left(2 - 2^{\frac{1}{3}}\right)}, \quad c_2 = c_3 = \frac{1 - 2^{\frac{1}{3}}}{2\left(2 - 2^{\frac{1}{3}}\right)}$$

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

- 偶数次の解法 → 二次の方法を合成して構成可能 [Yoshida \(1990\)](#)

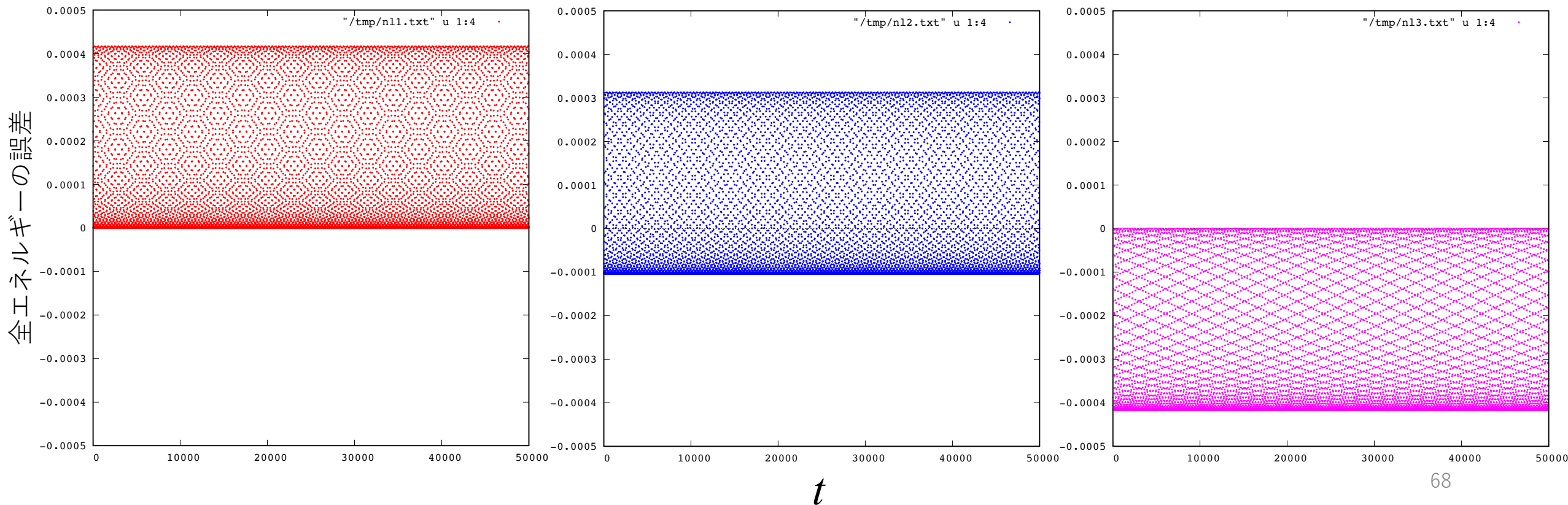
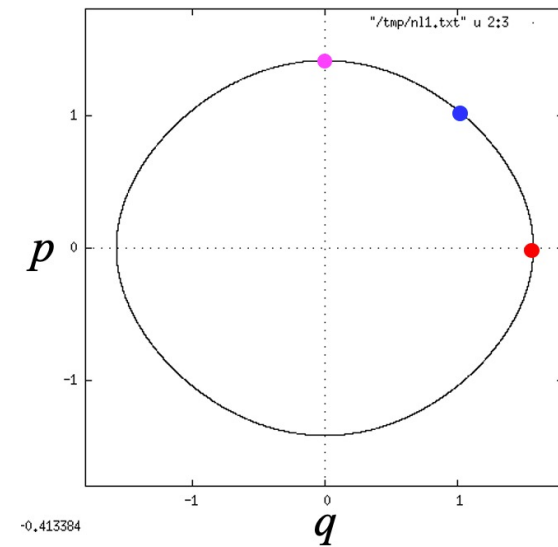
エネルギー—誤差と初期軌道

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



エネルギー誤差と初期軌道

- 全エネルギーの平均誤差
 - 軌道上の出発点(初期軌道)に依存する



エネルギー誤差と初期軌道

- ケプラー運動 → 軌道上の位置誤差 \propto 平均エネルギー誤差

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

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

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

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

$$l \propto nt$$

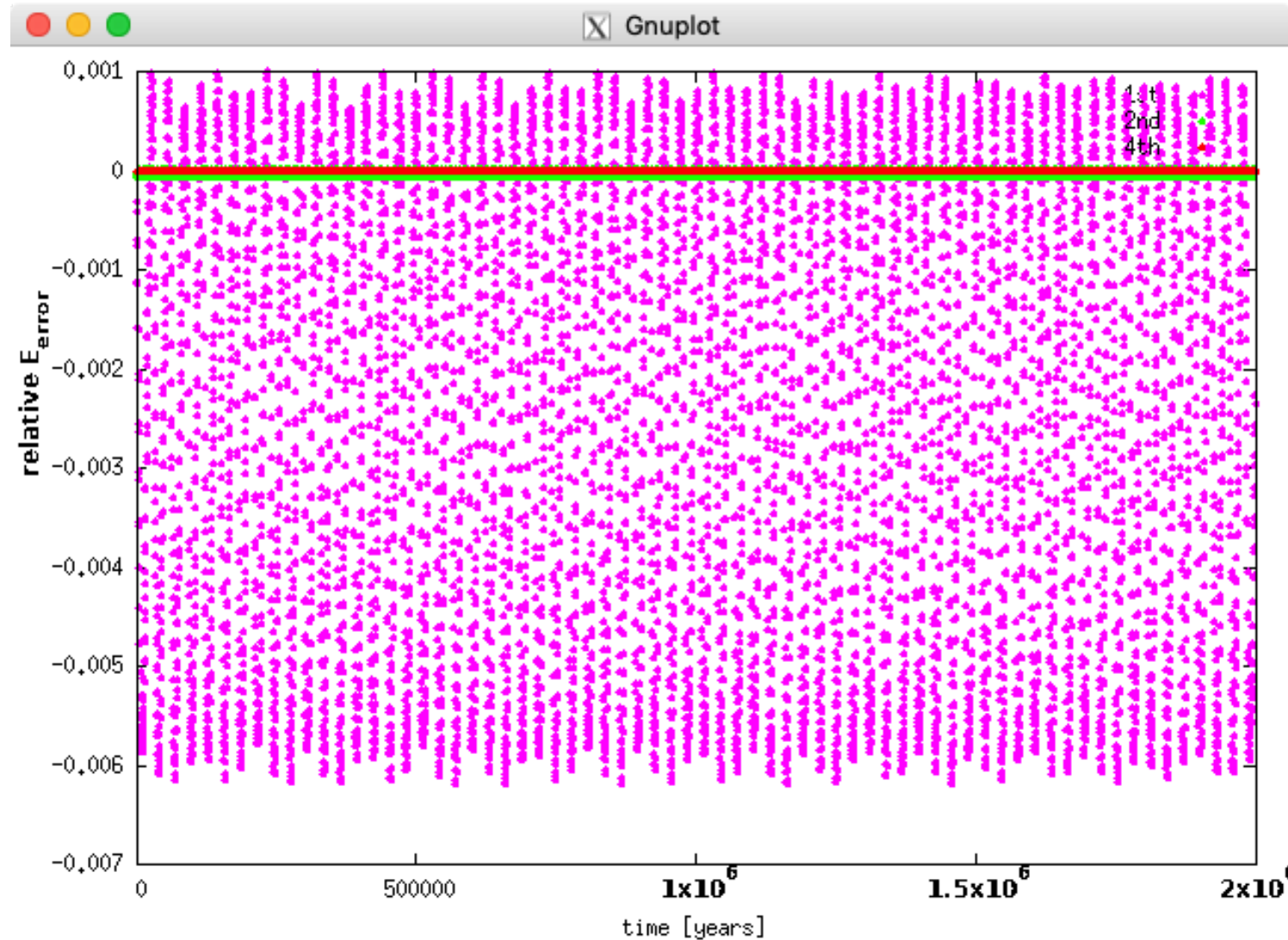
a : 軌道半長径

n : 平均運動

- エネルギー誤差(の平均値)を下げるのが重要
 - 誤差ハミルトニアン H_{error} の低減

計算例いくつか

N体の計算例 (N=6, 太陽+木星土天海冥)



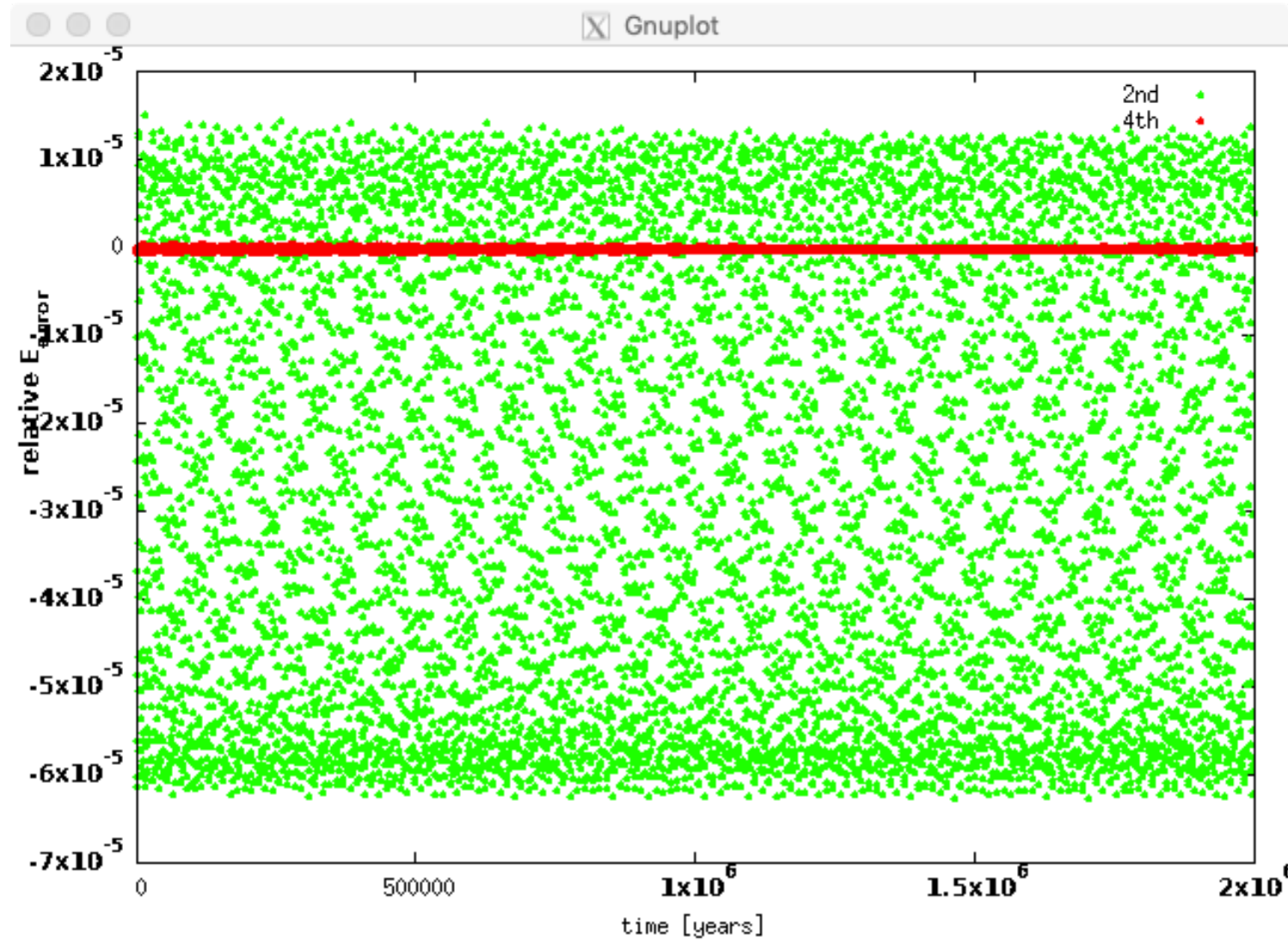
全エネルギーの
相対誤差

- 1次
- 2次 (LF)
- 4次

誤差の平均値の
0からのずれが
重要

時刻

N体の計算例 (N=6, 太陽+木星土天海冥)



全エネルギーの
相対誤差

- 2次 (LF)
- 4次

時刻

ハミルトニアン分割

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

[Hubaux+ \(2012\)](#)

Let us consider the following autonomous Hamiltonian function

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

ハミルトニアン分割

- 摂動が小さな系では以下の分割が有効

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

- 以下のようにも記す

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

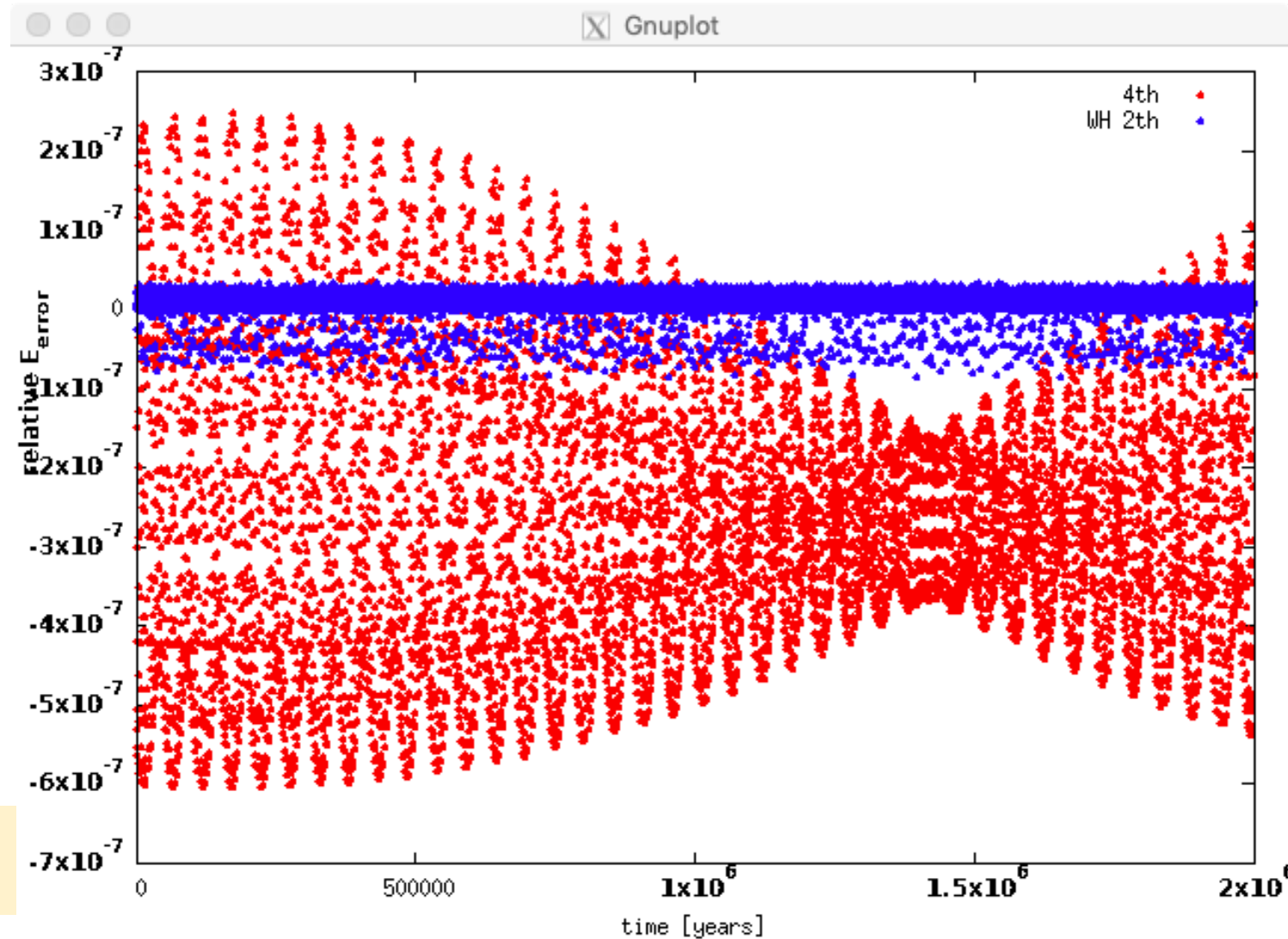
- 誤差ハミルトニアン (二次)

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

- 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+木星土天海冥)



全エネルギーの
相対誤差

● 4次
● 2次 LF
(Wisdom-Holman map)

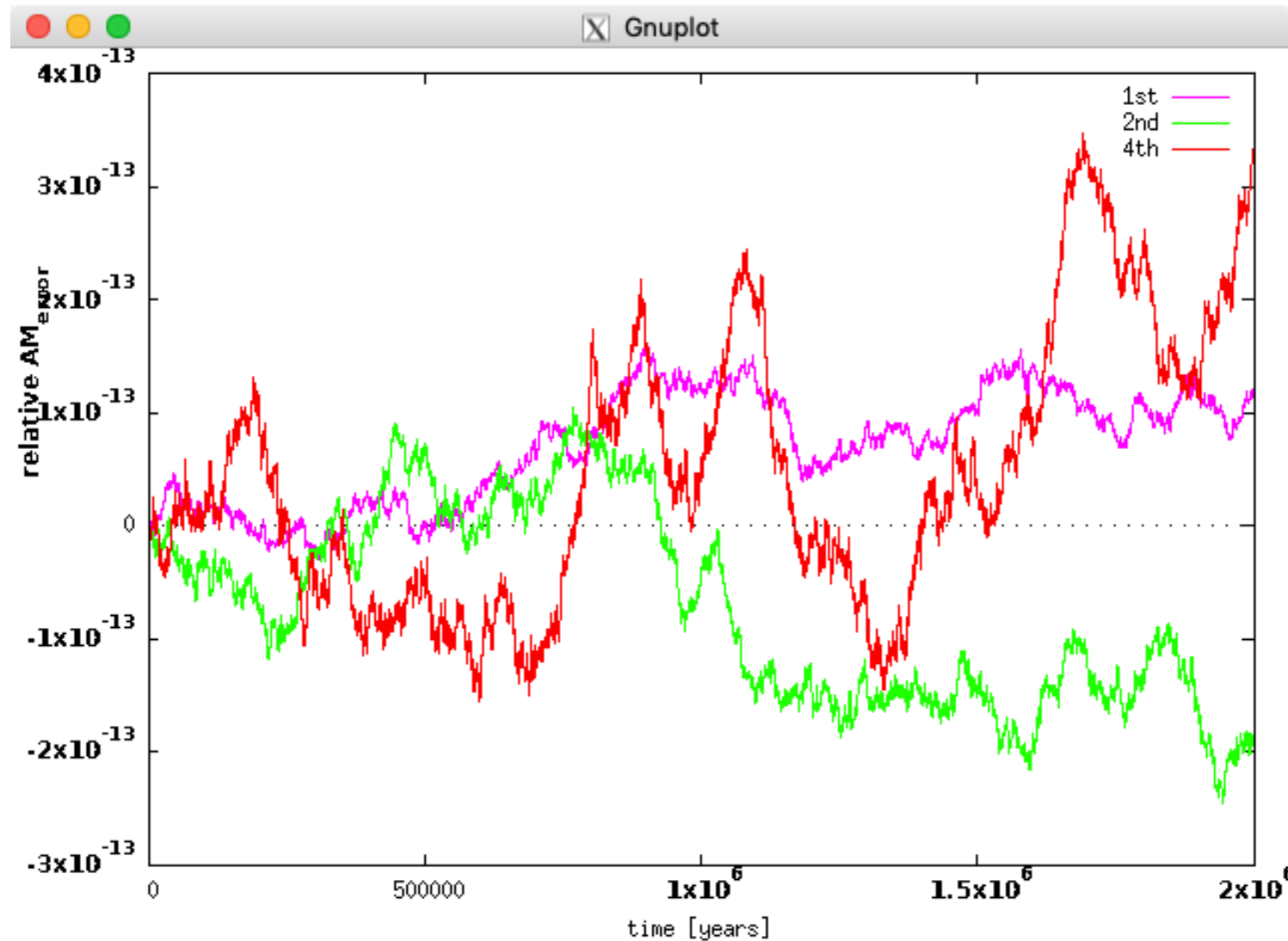
4次の方法の”うなり”は出力間隔のエイリアシング、または何らかの内部共鳴。誤差の平均値は増減しない

1.84394e+06, 2.52983e-07

時刻

N体の計算例 (N=6, 太陽+木星土天海冥)

全角運動量の
相対誤差



- 1次
- 2次 (LF)
- 4次

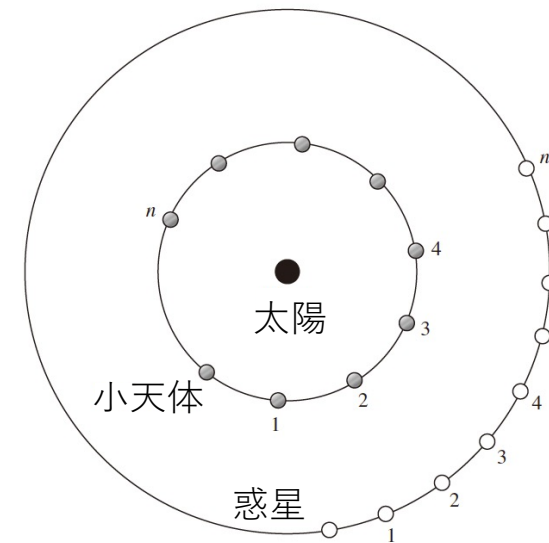
次数による
誤差の差異が
無い

時刻

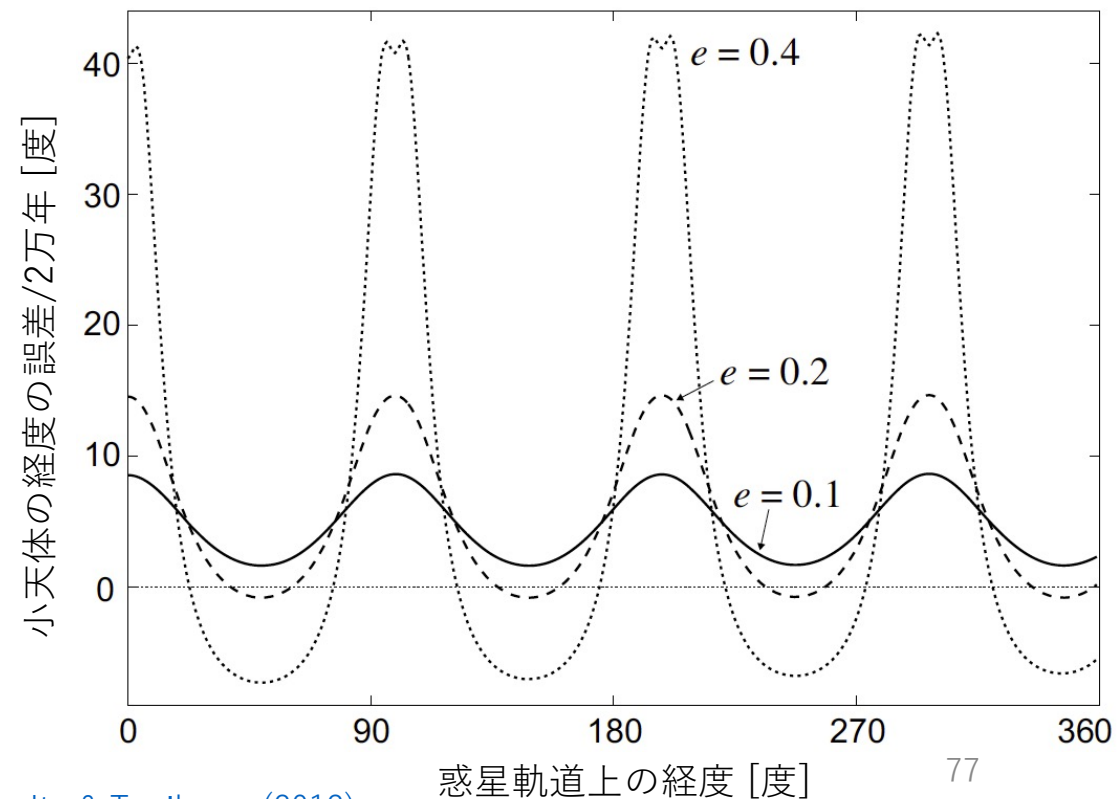
エネルギー誤差と初期軌道

- エネルギー誤差が極小となる軌道が初期軌道の近傍に

- それを探す方法の幾つか
 - 反復出発
 - 暖気出発
 - シンプレクティック修正子



e : 小天体の初期離心率



後半で述べた方法のまとめ

- 時間発展のシンプレクティック性が保たれる
- 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対称である
- $H = T(p) + V(q)$ 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できる → 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

Yoshida (1990,
preprint)

【参考】元の微分方程式が持つ或る性質を厳密に保持する解法

- 「幾何学的積分法」(geometric integration)

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

ご静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

参考にした資料

常微分方程式一般

- https://www2.yukawa.kyoto-u.ac.jp/~norihito.tanahashi/pdf/ODE/note_1.pdf
- <http://www.phys.u-ryukyu.ac.jp/%7Emaeno/sizensuugaku2016/lec17.html>

汎用的な数値解法

- http://www.den.t.u-tokyo.ac.jp/ad_prog/ode/
- https://www1.gifu-u.ac.jp/~tanaka/numerical_analysis.pdf
- <http://www.caero.mech.tohoku.ac.jp/publicData/Daiguji/Chapter7.pdf>
- http://www.slis.tsukuba.ac.jp/~fujisawa.makoto.fu/lecture/mic/text/08_derivative1.pdf

修正オイラー法

- <http://maya.phys.kyushu-u.ac.jp/~knomura/education/numerical-physics/text5/node2.html>
- <https://qiita.com/Dason08/items/d4c15283359d1bd83ae3>

打ち切り誤差

- <https://www.inaba-lab.org/wiki/index.php/シミュレーション>

過去のN体学校資料

- https://www.cfca.nao.ac.jp/~cfca/hpc/muv/text/makino_07.pdf

Runge-Kutta法

- https://en.wikipedia.org/wiki/Runge%E2%80%93Kutta_methods

正準変換・シンプレクティック形式

- [神戸大学陰山聡先生の講義資料その一](#)
- [神戸大学陰山聡先生の講義資料その二](#)
- <http://www.qi.mp.es.osaka-u.ac.jp/personal/imoto/index-j/jugyou/Kaiseki170727.pdf>

微分形式、外積

- <https://www.ms.u-tokyo.ac.jp/~asuke/kougi/kyoto/dual.pdf>
- <http://hooktail.sub.jp/differentialforms/ExteriorProds/>

Velocity Verlet

- <https://qiita.com/kaityo256/items/fd5a6ff3fcf0eb7bc860>

時間反転対称性

- <https://qiita.com/kaityo256/items/a4968a8de7ed636a2e79>

誤差ハミルトニアンと初期軌道（反復出発）

- <https://academic.oup.com/pasi/article/64/2/35/1481871>

幾何学的積分法

- <https://doi.org/10.1088/0305-4470/39/19/S01>

吉田春夫先生による解説記事

- https://www.istage.jst.go.jp/article/sicej1962/40/6/40_6_411/article/-char/ja/

N体系の全角運動量の厳密保存

- Yoshida (1990, preprint) → 電子版が存在しない。関心ある方は学校主催者へ連絡を 81

参考にした資料

汎用的な解法に関する定番の教科書

- <https://www.springer.com/gp/book/9783540566700>
- <https://www.springer.com/gp/book/9783540604525>

天体力学における多段法(対称型)の利用例

- <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/1999esra.conf..309F/abstract>
- <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/1996EM%26P...72..165K/abstract>

多分割ハミルトニアンを使った例

- <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/2012AdSpR..49.1472H/abstract>

プラズマ・核融合学会誌上の特集記事群

- http://www.jspf.or.jp/Journal/PDF_JSPF/jspf2015_01/jspf2015_01-jp.pdf
- http://www.jspf.or.jp/Journal/PDF_JSPF/jspf2015_02/jspf2015_02-jp.pdf
- http://www.jspf.or.jp/Journal/PDF_JSPF/jspf2015_03/jspf2015_03-jp.pdf

誤差ハミルトニアン

- <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/2017MNRAS.468.2614H/abstract>

暖機出発、階層的(独立)刻み幅

- <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/1992AJ....104.1633S/abstract>
- <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/1994AJ....108.1962S/abstract>

シンプレクティック修正子

- <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/1996FIC....10..217W/abstract>
- <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/2000CeMDA..77..305M/abstract>
- <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/2003ChA%26A..27..114W/abstract>
- <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/2019MNRAS.490.5122R/abstract>

CBHD公式

- <https://doi.org/10.1007/s00407-012-0095-8>
- <https://doi.org/10.1007/978-3-642-22597-0>
- <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/1991JMP....32..419O/abstract>
- <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/2009JMP....50c3513C/abstract>
- <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/2015JPhA...48v5207V/abstract>

シンプレクティック数値解法開拓期の代表的文献

- <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/1976JMP....17.2215D/abstract>
- <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/1990PhLA..150..262Y/abstract>
- <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/1990PhyD...43..105F/abstract>
- <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/1991CeMDA..50...59K>
- <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/1992AcNum...1..243S/abstract>
- <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/1993CeMDA..56...27Y>

参考にした資料

$H = H_0 + H_1$ ($H_1/H_0 \ll 1$) の分割の基礎

- <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/1991AJ....102.1528W/abstract>
- <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/1992AJ....104.2022W/abstract>

剛体の自転運動への応用

- <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/1994AJ....107.1189T/abstract>
- <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/2007PhRvE..75e6701V/abstract>
- <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/2019CeMDA.131...15L/abstract>

従来型の方法とシンプレクティック解法の結合

- <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/1999MNRAS.304..793C>

座標原点の変更による計算精度の向上

- <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/1994Icar..108...18L/abstract>

適応型刻み幅を実装することによる精度向上

- <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/1997CeMDA..67..145M/abstract>
- <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/1999CeMDA..74..287M/abstract>
- <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/1999MNRAS.310..745M/abstract>
- <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/2013MNRAS.430.2822M/abstract>
- <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/1999AJ....118.2532P/abstract>

階層的刻み幅を実装することによる精度向上

- <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/1998AJ....116.2067D/abstract>
- <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/1993JCoPh.109..318B/abstract>
- <https://citeseerx.ist.psu.edu/viewdoc/download?doi=10.1.1.28.9532&rep=rep1&type=pdf>

高離心率系や接近遭遇へのシンプレクティック解法の応用例

- <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/1999AJ....117.1087R/abstract>
- <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/2000AJ....120.2117L/abstract>
- <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/2002CeMDA..82..375M/abstract>
- <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/2002CeMDA..84..331E/abstract>
- <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/2015MNRAS.452..376R/abstract>
- <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/2017MNRAS.464.2350W/abstract>

シンプレクティック数値解法の誤差と信頼性

- <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/2001AJ....121.1768F/abstract>
- <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/2015AJ....150..127W/abstract>
- <https://ui.adsabs.harvard.edu/abs/2020MNRAS.493.1913H/abstract>

受講者の方よりお知らせ頂いた関連資料

- <http://courses.physics.ucsd.edu/2019/Winter/physics141/Lectures/Lecture2/volker.pdf>



Center for Computational Astrophysics