重力多体系の物理と数値計算法の基礎

牧野淳一郎
東京大学理学系研究科天文学専攻

平成 15 年 2 月 26 日

大体の講義計画

- 重力多体系の物理
  - 無衝突系
  - 衝突系と緩和
- 多体系の数値積分
  - 常微分方程式の数値積分法
  - 独立時間刻みと関係する話題

無衝突系

- 基礎方程式
- 力学平衡
  - ジーンズの定理
  - ジーンズ方程式
  - ビリアル定理・系の「比熱」

重力多体系の基礎方程式

もとの方程式自体はもちろん、各粒子の運動方程式

$$\frac{d^2 \boldsymbol{x}_i}{dt^2} = \sum_{j \neq i} G m_j \frac{\boldsymbol{x}_j - \boldsymbol{x}_i}{|\boldsymbol{x}_j - \boldsymbol{x}_i|^3}, \tag{1}$$

数値計算にはもちろんこれを使うわけだが、理論的な扱いには不便

というわけで、しばらくは (1 粒子) 分布関数 $f(x, v, t)$ で話をする。

この時の基礎方程式:(無衝突) ボルツマン方程式

(無衝突) ボルツマン方程式

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v \cdot \nabla f - \nabla \Phi \cdot \frac{\partial f}{\partial v} = 0, \tag{2}$$

f:6 次元位相空間での分布関数 Φ :重力ポテンシャル, 以下のポアソン方程式の解

$$\nabla^2 \phi = -4\pi G \rho. \tag{3}$$

ここで、 G は重力定数であり、 ρ は空間での質量密度

$$\rho = m \int dv f, \tag{4}$$

なお、以下の議論では (当分) m のことは忘れて、その代わり f が個数密度ではなくて質量分布であるということにしておく。

力学平衡

「力学平衡」= 上の無衝突ボルツマン方程式とポアソン方程式を連立させたものの定常解

ある分布関数 f が力学平衡にある= それによって決まるポテンシャル Φ を固定して考えた時に、f の時間微分が 0 になるということである。

普通の流体なら静水圧平衡にあたる。

当然であるが熱平衡とは限らない

無衝突ボルツマン方程式と熱平衡

力学平衡ではないところからの無衝突ボルツマン方程式に従った時間発展を考える。

これは流れにそって f を保存するので、系のエントロピー ($f \log f$ の積分) は一定、つまり、少なくとも形式的にはエントロピーは保存される。

もちろん、「形式的には」と断わるのは、もうちょっとややこしい問題があるから。これはあとで。

運動の積分

ポテンシャル Φ のもとで、ある x, v の関数 I が運動の積分であるとは、その上で

$$\frac{d}{dt} I(x, v) = 0, \tag{5}$$

がなり立つこと。

つまり、実際にすべての粒子の軌道について、その上でその量が変化しないということ

ちょっと変形すれば

$$v \cdot \nabla I - \nabla \Phi \cdot \frac{\partial I}{\partial v} = 0 \tag{6}$$

無衝突ボルツマン方程式の定常解と同じ式

ジーンズの定理

I について以下の「ジーンズの定理」がなり立つ。

ジーンズの定理 任意の無衝突ボルツマン方程式の定常解は、運動の積分を通してのみ位相空間座標に依存する。逆に、任意の運動の積分の関数は定常解を与える。

いいかえると、分布関数 f が定常であるためには、運動の積分 $I_1, I_2, ..., I_m$ があって $f = f(I_1, I_2, ..., I_m)$ の形で書けることが必要十分ということ。

証明

まず「定常ならば運動の積で書ける」というほうを考えてみる。これは、f 自体が運動の積分の定義を満たしているので、OK。

逆のほうは、実際に f の全微分を I_k で書き下せば、それぞれが 0 になるということからいえる。

というわけで、これはなかなか強力な定理だが、一般の場合にはそれほど役に立つわけではない。というのは、ポテンシャルを与えた時に一般に運動の積分というのは 5 個あるはずだが、それらをすべて知っているということはないからである。

ただし、球対称とか軸対称とか条件をつけると、いろいろちゃんと決まるようになる。以下、まず球対称の場合を考える。

球対称の場合

球対称の場合、運動の積分はエネルギーと角運動量の 3 成分で 4 つ。

一般にはもう一つあるが、これは特別な場合を除いてあまり意味がないので、定常な分布関数はエネルギーと角運動量だけで書けると思っていい。

意味がある特別な場合: ケプラー軌道のような、軌道が閉じる場合。

この時には、エネルギーと角運動量の他に、軌道全体の向きを表す量 (近点経度) が保存する。これはちゃんと保存量になっている。

普通の場合は

一般には軌道が閉じない。

近点経度に対応するような保存量は実は存在している

ある軌道はエネルギーと角運動量で決まる部分空間を覆ってしまう

(数学的には、もちろんすべての点を覆えるのではなく、任意の点について、いくらでも近くにいけるというだけだが)。

その保存量に分布関数が依存すると、連続性とか微分可能性とかに困難を生じる。あんまり物理的ではない。

$f(E, J)$

f は E と J によるということにしたわけだが、いま球対称な場合ということなので J の方向にではなく、絶対値だけに依存するのでないといけない。したがって、実は球対称の分布関数は一般に $f(E, J)$ と書けるということになる。

我々が扱いたいのは自己重力系なので、実際にポアソン方程式を球対称の場合に書き下してみると

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d\Phi}{dr}\right) = 4\pi G \int f\left(\frac{1}{2}v^2 + \Phi, |r \times v|\right) dv, \quad (7)$$

てな感じになる。

Jeans Equations

無衝突ボルツマン方程式

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \mathrm{v}\cdot\nabla f - \nabla\Phi\cdot\frac{\partial f}{\partial \mathrm{v}} = 0, \quad (8)$$

のモーメントをとっていろいろ考えてみる。

速度空間全体で積分

第 3 項は発散定理で表面積分に置き換えられ、結局 0 になる。

速度空間で積分 (続き)

最初の 2 項は

$$\nu = \int f d^3\mathrm{v}; \bar{v}_i = \frac{1}{\nu}\int f v_i d^3\mathrm{v} \quad (9)$$

と置いてやれば (密度と、局所的な平均速度)

$$\frac{\partial \nu}{\partial t} + \frac{\partial(\nu\bar{v}_i)}{\partial x_i} = 0 \quad (10)$$

これは、流体の場合の連続の式と同じものである。

もうちょっといろいろする

さらに、速度の 1 次のモーメントをとるために Collisionless Boltzman に v_j を掛けて積分してみると、

$$\frac{\partial}{\partial t}\int f v_j d^3\mathrm{v} + \int v_i v_j \frac{\partial f}{\partial x_i} d^3\mathrm{v} - \frac{\partial\Phi}{\partial x_i}\int v_j \frac{\partial f}{\partial v_i} d^3\mathrm{v} = 0, \quad (11)$$

というような式が出てくる。但し、 i についての和をとっていることに注意。

さて、$v_j f$ について発散定理 (1 次元) を使えば

$$\int v_j \frac{\partial f}{\partial v_i} d^3\mathrm{v} = -\int \frac{\partial v_j}{\partial v_i} f d^3\mathrm{v} = -\delta_{ij}\nu \quad (12)$$

となるので、結局

$$\frac{\partial(\nu\bar{v}_j)}{\partial t} + \frac{\partial(\nu\overline{v_i v_j})}{\partial x_i} + \nu\frac{\partial\Phi}{\partial x_j} = 0 \quad (13)$$

但し、$\overline{v_i v_j}$ は $v_i v_j$ の局所平均である。もうちょっと見通しの立つ式にするために、まず連続の式を使って第一項から $\partial\nu/\partial t$ を消すと

$$\nu\frac{\partial\bar{v}_j}{\partial t} - \bar{v}_j\frac{\partial(\nu\bar{v}_i)}{\partial x_i} + \frac{\partial(\nu\overline{v_i v_j})}{\partial x_i} + \nu\frac{\partial\Phi}{\partial x_j} = 0 \quad (14)$$

さらに、

$$\sigma_{ij}^2 = \overline{(v_i - \bar{v}_i)(v_j - \bar{v}_j)} \quad (15)$$

を使って書き直すと

Jeans 方程式

$$\nu\frac{\partial\bar{v}_j}{\partial t} + \nu\bar{v}_i\frac{\partial\bar{v}_j}{\partial x_i} = -\nu\frac{\partial\Phi}{x_j} - \frac{\partial(\nu\sigma_{ij}^2)}{\partial x_i} \quad (16)$$

これは、流体の場合のオイラー方程式 (運動方程式) と大体同じ格好になっている。左辺は平均の流れに沿ってみた平均速度の Lagrange 微分であり、右辺第一項はポテンシャルから力である。

最後の項は普通なら圧力の項が出てくる。流体と違うのは、ここが非等方的な stress tensor σ_{ij}^2 になっているということである。

なお、いうまでもないが、速度分布が等方的であれば stress tensor は $\sigma^2 I$ (I は単位行列) の形に書ける。

例：球対称恒星系の M/L

密度分布が球対称で平均の流れがない場合、極座標系での Jeans equation は以下の形に書き直せる：

$$\frac{d(\nu\overline{v_r^2})}{dr}+\frac{\nu}{r}\left[2\overline{v_r^2}-\left(\overline{v_\theta^2}+\overline{v_\phi^2}\right)\right]=-\nu\frac{d\Phi}{dr} \tag{17}$$

(証明は、、、まあ、面倒なだけなので省略) もうちょっと話を簡単にするために、等方的な場合を考えると、結局

$$\frac{1}{\nu}\frac{d(\nu\overline{v_r^2})}{dr}=-\frac{d\Phi}{dr} \tag{18}$$

すなわち

$$M(r)=-\frac{r\overline{v_r^2}}{G}\left(\frac{d\ln\nu}{d\ln r}+\frac{d\ln\overline{v_r^2}}{d\ln r}\right) \tag{19}$$

ビリアル定理

さらに空間全体のモーメントをとる。

式 13 において、密度 ν を質量密度 ρ で置き換え、さらに x_k を掛けて空間全体で積分する。

$$\int x_k\frac{\partial(\rho\bar{v}_j)}{\partial t}d^3\mathrm{x}=-\int x_k\frac{\partial(\rho\overline{v_iv_j})}{x_i}d^3\mathrm{x}-\int\rho x_k\frac{\partial\Phi}{x_j}d^3\mathrm{x} \tag{20}$$

右辺の最初の項は、例によって発散定理を使って書き直せる。

$$\int x_k\frac{\partial(\rho\overline{v_iv_j})}{x_i}d^3\mathrm{x}=-\int\delta_{ki}\rho\overline{v_iv_j}d^3\mathrm{x}=-2K_{kj} \tag{21}$$

これは、運動エネルギテンソル K の定義を与える。ついでに第二項はポテンシャルエネルギーテンソル W と呼ばれるものである。

ビリアル定理 (続き)

さらに、 σ^2 の定義を使って、

$$K_{jk}=T_{jk}+\frac{1}{2}\Pi_{jk} \tag{22}$$

但し

$$T_{jk}=\frac{1}{2}\int\rho\bar{v}_j\bar{v}_kd^3\mathrm{x},\quad \Pi_{jk}=\int\rho\sigma_{jk}^2d^3\mathrm{x}, \tag{23}$$

さらに、 j,k についての式と k,j についての式を足してやると

$$\frac{1}{2}\frac{d}{dt}\int\rho(x_k\bar{v}_j+x_j\bar{v}_k)d^3\mathrm{x}=2T_{jk}+\Pi_{jk}+W_{jk} \tag{24}$$

ビリアル定理 (続き 2)

さらに、慣性モーメントテンソル

$$I_{jk}=\int\rho x_jx_kd^3\mathrm{x} \tag{25}$$

を導入して、連続の式とか発散定理とかを使うと

$$\frac{dI_{jk}}{dt}=\int\rho(x_k\bar{v}_j+x_j\bar{v}_k)d^3\mathrm{x} \tag{26}$$

で、結局

$$\frac{1}{2}\frac{d^2I_{jk}}{dt^2}=2T_{jk}+\Pi_{jk}+W_{jk} \tag{27}$$

これをテンサービリアル定理という。

スカラービリアル定理

今定常状態 （ I の時間微分が 0) を考え、さらに上の式のトレースをとってみると、T,Π の定義からこれらの寄与は全運動エネルギー K の 2 倍になる。W の方は、Φ の定義を使えば

$$W=\int\rho\sum_k x_k\frac{\partial\Phi}{\partial x_k}d^3\mathrm{x}=\int\int\rho(\mathrm{x})\rho(\mathrm{x}')\sum_k\frac{x_k(x_k-x_k')}{|\mathrm{x}-\mathrm{x}'|^3}d^3\mathrm{x}d^3\mathrm{x}' \tag{28}$$

ここで x と x'を入れ換えた積分を書き、両方を足すと

$$W=\frac{1}{2}\int\int\rho(\mathrm{x})\rho(\mathrm{x}')\sum_k\frac{(x_k-x_k')^2}{|\mathrm{x}-\mathrm{x}'|^3}d^3\mathrm{x}d^3\mathrm{x}'=\frac{1}{2}\int\rho\Phi d^3\mathrm{x} \tag{29}$$

というわけで、 W は系の全ポテンシャルエネルギーである。

スカラービリアル定理 (続き)

結局、

$$2K+W=0 \tag{30}$$

が成り立つ。これを、スカラービリアル定理、または単にビリアル定理という。

今、系の全エネルギーを E とすれば、 $E=K+W$ であるから、

$$E=-K=W/2 \tag{31}$$

ということになる。つまり、定常状態にある自己重力恒星系では、必ず全エネルギーはポテンシャルエネルギーのちょうど半分であり、絶対値が運動エネルギーに等しい。これは球対称とかそういう仮定なしに常に正しい。

系の「比熱」

自己重力系は熱平衡ではありえない。しかし、 $\mathrm{King\ model}$ のように近似的に熱平衡なものもあるので、ここでエネルギーの出入りに対する系全体の応答、つまり比熱というものを考えてみる。

ビリアル定理から $K = -E$、つまり、「エネルギーを奪うと運動エネルギーが増え、逆ならその逆になる」。つまり、見かけ上比熱が負になっている。これは重力が効く系では普通のことで、例えば地球を回る人工衛星といったものでも同様のことが起こっているわけである。

この、「見かけ上比熱が負」ということが、熱力学的不安定を通して構造形成（自己組織化）が起きる基本的な理由である。

衝突系

ここまでの話:粒子数無限大

実際の系、数値実験:粒子数小さい

(大抵は数値実験では実際より小さい)

この場合、「衝突項」 $\partial f/\partial t|_{\mathrm{coll}}$ の効果が無視できない。 以下、その話。

基本的に衝突項は「2 体散乱」の効果 (多体の効果は無視できる)、つまりいわゆる 2 体緩和を考えればいい (らしい)。

無視できないのはどういう場合か

- 現実の系で無視できない
  - 球状星団、散開星団、銀河中心
  - 惑星形成過程
- 現実の系では小さいけどシミュレーションでははいってくる
  - 上以外の全て
  - 例: 銀河形成、宇宙論 (N 体、 N 体$+\mathrm{SPH}$ のどちらでも)

２体緩和

２体緩和とはなにか？

原理的には結構厄介な問題

有限粒子数の自己重力多体系の進化

最初は力学平衡ない $\rightarrow$ まず力学平衡に

有限粒子数: 真の力学平衡というものはない。

有限の質量をもった各粒子が系の中を運動するに従って、ポテンシャルが必ず変化する。この変化によって各粒子の軌道も変化することになる。

効果の分離

粒子の軌道の変化を、粒子数が有限であることから来る成分とそれ以外に分離することは可能？

系が力学平衡にあるとみなすことができればそれは可能。

力学平衡にあれば、粒子のエネルギー変化は定義によりすべて粒子数が有限であることによる。

が、良く考えると問題なのは、そもそも有限粒子数であるものを力学平衡とみなすとはどういうことかということである。このあたりを考えていると段々混乱してくるので、まず、理想化された状況から考えていくことにする。

理想化：一様等方な分布

例えばマックスウェル分布があって、その中の一つの粒子をとって考えるということをしたいわけだが、これも結構厄介なのでさらに簡単な例を考える。

速度0で空間内に一様（ランダム）に分布した質点を考え、その中を質量0のテスト粒子を飛ばして見る。

この場合エネルギー交換はないので速度は変わらず、単に散乱されるだけ

しかし、この例は２体緩和のいくつかの重要な性質を示すのですこし詳しく見ていくことにする。

もっとも簡単な例

分布している質点の質量を m、数密度を n とする。テスト粒子が一つの粒子から距離 (インパクトパラメータ) b を速度 v で通った時に曲がる角度は、実際にケプラー問題の解析解を使って

$$\begin{aligned} \tan\theta &= \frac{2b}{(b/b_0)^2-1} \\ b_0 &= \frac{Gm}{v^2} \end{aligned} \tag{32}$$

で与えられる。単位時間当たり、インパクトパラメータが $(b, b+db)$ の範囲にある散乱の回数は $2\pi n v b db$ である。

角度の変化

散乱の方向はランダム

従って平均としては (一次の項は) 0 になる。

しかし、 2 次の項は 0 にならない。これは

$$< \Delta\theta^2 >= 2\pi n v \int_0^{b_{max}} \delta\theta^2 b db \tag{33}$$

で与えられることになる。

この式から既にいろいろな性質がわかる。が、その前に理論的な困難を解決しておく必要があるであろう。すなわち、この積分は $b \to \infty$ で発散しているのである。

発散の解消

初めて 2 体緩和の性質を理論的に調べた Chandrasekhar は、以下のように考えた。

「 平均粒子間距離よりもインパクトパラメータが大きいような散乱は、多体の干渉によって効かなくなるのでそこで積分を打ち切ってよい 」

多体の干渉なんて本当にあるか？

もっと素直な解釈:実際に系にあるすべての粒子と常に同時に相互作用しているのだから、システムサイズくらいまで全部いれる (系が構造を持つ場合はちょっとややこしいが、密度の空間依存も積分のなかに入れて全空間で積分する)

積分の上限

数値実験の結果などから、後者の解釈すなわち全体が効くというほうが正しいということはかなり昔から大体わかっていた。

歴史的には、どちらの解釈が正しいかについてはかなり最近まで論争があって、完全に決着がついたといえるのは 94-5 年頃である。

まあ、現在では後者の解釈が正しいということに疑いの余地はない。

緩和時間

前の式から、適当に近似すると

$$< \Delta\theta^2 > \sim G n v^{-3} m^2 \log(R/r_0) \tag{34}$$

R は先に述べたシステムの大きさ、 r_0 は「大きく曲がる」ためのインパクトパラメータの値で、$b_0 = GM/v^2$ の程度。

角度変化が 1 の程度になる時間というのを求めてみると、

$$t_\theta \sim \frac{v^3}{Gnm^2 \log\Lambda} \tag{35}$$

となる。ここで Λ は上の R/r_0 を単に書き換えただけである。

今、$\log\Lambda$ の質量依存性といったものを無視すると、散乱のタイムスケールは速度の 3 乗、数密度の逆数、質量の 2 乗の逆数に比例するということがわかったことになる。

多体系の緩和時間

前の式から、特に、質量密度一定の場合というものを考えてみると、タイムスケールが各粒子の質量に比例するということがわかる。

ある大きさを持った多体系というものを考えてみよう。質量 M、特徴的な半径 (ビリアル半径か何か) R、粒子数 N とすれば、ビリアル定理から $v^2/2 = GM/R$、力学的なタイムスケールが $t_d \sim \sqrt{R^3/GM}$ となる。これを使うと上の緩和のタイムスケールは

$$t_\theta \sim \frac{N}{\log N} t_d \tag{36}$$

となる。粒子数が大きいほど無衝突系に近付くのだから、まあ、当然の結果といえなくもない。

バックグラウンド速度分布が熱平衡の場合

速度分布を熱平衡、すなわち

$$f_0(\mathrm{v}) = \frac{n_f}{(2\pi\sigma^2)^{3/2}} \exp\left(\frac{-v^2/2}{\sigma^2}\right) \tag{37}$$

とすると、

$$< \Delta v_{\text{平行}} > \ = \ -4\frac{n_f \Gamma}{\sigma^2}\left(1+\frac{m}{m_f}\right) G(x) \tag{38}$$

$$< \Delta v^2_{\text{平行}} > \ = \ 2\sqrt{2}\frac{n_f \Gamma}{\sigma} G(x)/x \tag{39}$$

$$< \Delta v^2_{\text{垂直}} > \ = \ 2\sqrt{2}\frac{n_f \Gamma}{\sigma}\frac{\mathrm{erf}(x) - G(x)}{x} \tag{40}$$

$$< \Delta E > \ = \ \sqrt{2}\frac{n_f \Gamma}{\sigma}\left[-\frac{m}{m_f}\mathrm{erf}(x) + \left(1+\frac{m}{m_f}\right) x\mathrm{erf}'(x)\right] \tag{41}$$

ここで erf は誤差関数であり、

$$G(x) = \frac{\mathrm{erf}(x) - x\mathrm{erf}'(x)}{2x^2} \tag{42}$$

また $x = v_t/(\sqrt{2}\sigma)$ である。

式の意味

まず、速度の 1 次の項を見てみる。

$$< \Delta v_{\text{平行}} >= -4\frac{n_f \Gamma}{\sigma^2}\left(1+\frac{m}{m_f}\right) G(x) \tag{43}$$

$$G(x) = \frac{\mathrm{erf}(x) - x\mathrm{erf}'(x)}{2x^2} \tag{44}$$

$x = v_t/(\sqrt{2}\sigma)$

タイムスケールを考えてみると、速度が大きい極限では減速のタイムスケールが v^3 であるのに対し、逆の極限では 一定になる

速度が小さいほうではタイムスケールがある一定値、つまりは $v \sim \sigma$ で決まる値あたりになる。

Dynamical Friction

1 次の項は、前に述べたように dynamical friction を表している。

恒星系が質量の違う 2 つの成分から出来ているような場合:

力学平衡で、分布関数に質量依存がないようなものを考えると、これは熱平衡から遠くはなれている。従って、上の式で決まるタイムスケールで重いものがエネルギーを失い、軽いものがエネルギーを得る。

2 次の項

次に、2 次の項を見てみる。

$$< \Delta v^2_{\text{平行}} > \ = \ 2\sqrt{2}\frac{n_f \Gamma}{\sigma} G(x)/x \tag{45}$$

$$< \Delta v^2_{\text{垂直}} > \ = \ 2\sqrt{2}\frac{n_f \Gamma}{\sigma}\frac{\mathrm{erf}(x) - G(x)}{x} \tag{46}$$

$$\tag{47}$$

速度に平行な成分も垂直な成分も、 v が大きい極限では 0 にいく。これに対し、速度が 0 の極限では、どちらも一定値に収束する。これは停止している極限でも、回りの粒子によって揺さぶられるということを表している。

2 体緩和の意味

- 実際の系の進化をドライブ
  - 球状星団
  - 惑星形成過程
- 数値計算の「誤差」

良くある勘違い

- half-mass relaxation time が宇宙年齢より長いから緩和は効かない
  - 密度が高い and/or 速度分散が小さいところでは局所的に緩和が速い
- ソフトニングが平均粒子間隔より大きいと緩和は起きない
- 無衝突な計算コード (PM, SCF 等) を使っていると緩和は起きない
  - クーロン積分の下限を実効的に小さくするだけ

2体緩和を抑えるには？

基本的には、粒子数を増やす以外に緩和を抑える方法はない。

大規模計算が重要な理由

計算法

原理的には、多体シミュレーションはとっても単純：
運動方程式

$$\frac{d^2\boldsymbol{x}_i}{dt^2} = \sum_{j\neq i} Gm_j \frac{\boldsymbol{x}_j - \boldsymbol{x}_i}{|\boldsymbol{x}_j - \boldsymbol{x}_i|^3}, \tag{48}$$

を数値積分するだけ。

右辺を計算するプログラム： 2 重ループで 10 行くらい
時間積分： なにかルンゲクッタとか適当なものを使えばいい

というだけで話が済めばいいけれど、もちろん世の中はそんなに簡単ではない。

何が問題か？

- 計算精度の問題： 2粒子の近接散乱、自己重力による構造形成 — 時間刻みをどんどん短くしないとちゃんと計算できなくなる。
  積分時間が長いので高精度の公式を使いたい。
- 計算量の問題： 右辺の計算量が $O(N^2)$ — N が少し大きくなるとすぐに計算時間が現実的ではなくなる

まず、時間領域の話の基礎を。

計算法 — 時間領域

算数としては、単に常微分方程式の初期値問題の数値解。まず、数値解法にはどういうものがあるかというのを概観しておく。

- ルンゲ・クッタ法
- 予測子・修正子法
- 外挿法

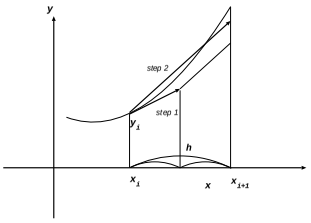
ルンゲ・クッタ

ルンゲ・クッタ法というのは、ある一般的な形に書ける公式のクラスであるが、ちょっとわかりにくいのでまず例から。

二次のルンゲ・クッタ法

以下のような計算法を考える

$$\begin{aligned} k_1 &= x_i + \frac{h}{2} f(x_i, t_i) \\ x_{i+1} &= x_i + h f(k_1, t_i + h/2) \end{aligned} \tag{49}$$



これは２次精度 (他にも２次精度の公式はある)。

ルンゲ・クッタの一般形

$$\begin{aligned} x_{n+1} &= x_n + h \sum_{i=1}^{s} b_i k_i \\ k_i &= f(x_n + h \sum_{j=1}^{s} a_{ij} k_j, t_n + c_i h) \end{aligned} \tag{50}$$

s :段数 (number of stages) という。

a_{ij}, b_i, c_i はパラメータ

a と c は普通

$$c_i = \sum_{j=1}^{s} a_{ij} \tag{51}$$

となるようにとる。

2段の公式

$s = 2$の場合に書き下してみると

$$\begin{aligned} x_{n+1} &= x_n + h(k_1 b_1 + k_2 b_2) \\ k_1 &= f(x_n + h(a_{11} k_1 + a_{12} k_2), t_n + c_1 h) \\ k_2 &= f(x_n + h(a_{21} k_1 + a_{22} k_2), t_n + c_2 h) \end{aligned} \tag{52}$$

と、まあ、こんな感じ。

- $a_{ij} \quad (j \geq i)$ がすべて0ならば、k_1 から順に計算していくことができる。つまり、「陽的」公式になっている。
- $a_{ij} \quad (j > i)$ が0のときは、各 k_i についての式に k_i だけが入ってくる。これを半陰的 (semi-implicit) 公式という。この場合には、まず k_1 についての方程式をといて、次に k_2 についてのを解いて、、、と順番に計算出来る。

陰公式

- 制約が全くない時は、「陰的」公式ということになる。このときは、すべての k_i に対する (一般には非線形な) 方程式を一度に解く必要がある。

なぜ陰的公式といった面倒なものをつくるかというのはよくわからないかもしれない。これについてはあとで説明するとして、まず、陽的公式の例について述べる。

古典的 Runge-Kutta法

陽的ルンゲ・クッタ法のなかでもっとも広く使われているのが「古典的」といわれる公式である。書き下すと、

$$\begin{aligned} x_{n+1} &= x_n + h(k_1/6 + k_2/3 + k_3/3 + k_4/6) \\ k_1 &= f(x_n, t_n) \\ k_2 &= f(x_n + h k_1/2, t_n + h/2) \\ k_3 &= f(x_n + h k_2/2, t_n + h/2) \\ k_4 &= f(x_n + h k_3, t_n + h) \end{aligned} \tag{53}$$

というものである。これは、いろいろ良い性質をもつ。

古典的 Runge-Kutta法の特長

1. a_{ij} が $i - j = 1$ 以外すべて0なので、右辺の計算が楽である。
2. 次数が4次であり、4段陽的公式で到達可能な最高次数を達成している
3. 係数が簡単な有理数なので、プログラムしやすい。また丸め誤差を小さくできる。

この公式が 4 次であることを示すのは、それほど簡単ではない。腕力に自信があるひとは挑戦してみて欲しい。

陽公式の到達可能次数

理論的、あるいは実用上重要なのは、段数を決めた時に、次数がいくつまで可能かということである。が、これは一般の場合には未解決であり、以下の結果しかわかっていない

s	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	$s \geq 10$
p	1	2	3	4	4	5	6	6	7	7	$p \leq s-2$

ある段数で、到達可能な最高次数を達成する公式というのは一通りではない。2段2次の場合でも、自由パラメータが一つあって「無限個」の公式があり得るわけである。段数が増えれば自由パラメータの数も増える。

どういう公式がいいか？

それではどういう公式を使うべきかというのは、精力的な研究が行なわれてきた。問題にもよるが、例えば

1. 局所離散化誤差の係数が小さい
2. 係数の数字が簡単な有理数になる
3. 係数に0が多い

というようなことはそれぞれ実用的には重要である。

Dormand と Prince は、段数 / 次数のさまざまな組合せについて、局所離散化誤差を非常に小さくした公式を求めた。

`http://www.unige.ch/math/folks/hairer/software.html`

から入手できる (Fotran と C がある)。

刻み幅調節

ある精度で計算したい: 要求精度に応じて刻み幅を変える必要あり

計算時間の無駄を減らす: 局所誤差が小さい (解が滑らかな) ところは刻みを大きく、逆に解が急にかわるところでは刻みを小さくする。

可変刻み (variable step) / 適応刻み (adaptive step)

どうやって刻み h を変えるか = どうやって誤差を推定するか

埋め込み型公式

RK型の公式

$$\boldsymbol{x}_{n+1} = \boldsymbol{x}_n + \sum_{i=1}^{s} \boldsymbol{b}_i \boldsymbol{k}_i \tag{54}$$

$\boldsymbol{k}_i$ は全部そのまま使って、 $\boldsymbol{b}_i$ を別の$\boldsymbol{b}'_i$に置き換える

$$\boldsymbol{x}' = \boldsymbol{x}_n + \sum_{i=1}^{s} \boldsymbol{b}'_i \boldsymbol{k}_i \tag{55}$$

$\boldsymbol{x}'$ が局所離散化誤差が元の公式よりも大きいが、むやみと大きくはない (例えば、一次次数が低い) なら、元の公式との差を誤差の推定に使うことができる。

この形の公式のことを埋め込み型 embedded 公式という。最初に提案した人の名前をとって Runge-Kutta-Fehlberg 公式ということも多い。Dormand-Prince はこの形である。

陰的ルンゲクッタ公式

陰的公式は、(理論的には) 素晴らしい性質をもつ。

「s段陰的公式の到達可能次数は $2s$ である。」

これのため、いくらでも次数の高い公式をつくることができる。陽的な場合には8次よりも高次のものはほとんど知られていないのとは対照的である。

これは単なる存在証明ではなく、実際に $2s$ 次の公式が構築されている。これは実はユニークに決まり、「陰的ガウス公式」と呼ばれるものがそれ。

詳しい話は省略。

線形多段階法

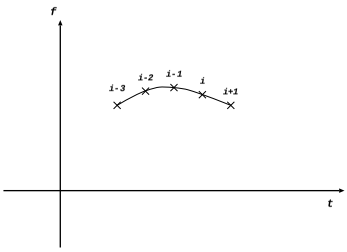
ルンゲ・クッタ法:「一段階法」t_i における解 x_i がわかっていれば、それだけから次の時刻 t_{i+1}での解 x_{i+1} が求まる。

多段法: t_i での情報だけでなく、その前のステップでの情報 (導関数の値や解そのものの値) を記憶しておいて、それを使う。

これにより、余計な計算をしないで計算精度をあげたい。

アダムス法

原理: いくつかのステップでの導関数（微分方程式の右辺）f の値を憶えておいて、それを通る補間多項式を作り、それを積分して解を求める。



左の図に概念を示す。ここでは、積分公式の時と同様にラグランジュ補間（ニュートン補間）をして多項式を作る。で、その作った多項式を積分する。

アダムス法の実際

例えば、点 i から $i+1$まで積分するのに、点 $i-p$ から i までの関数値を使うとすれば、p次の多項式で

$$P(t_j) = f_j = f(x_j, t_j) \quad (i-p \leq j \leq i) \tag{56}$$

を満たすものを作る。で、$i+1$での解 x_{i+1}は

$$x_{i+1} = x_i + \int_{t_i}^{t_{i+1}} P(t)dt \tag{57}$$

で与えられる。刻み hが定数であるとすれば、pを決めれば上の式を

$$x_{i+1} = x_i + h \sum_{l=0}^{p} a_{pj} f_{i-l} \tag{58}$$

の形に書き直せる。

2次の公式

簡単な例として、$p=1$の場合を考えてみよう。この時、補間多項式は一次であって

$$P(t) = f_i - \frac{f_{i-1} - f_i}{h}(t - t_i) \tag{59}$$

となって、これを積分すれば、結局

$$x_{i+1} = x_i + \frac{h}{2}(3f_i - f_{i-1}) \tag{60}$$

となる。

一般に、アダムス法では任意段数の公式が構成でき、その次数は段数に等しいことがわかっている。これは、ルンゲ・クッタなどに比べればはるかによい性質をもっているということでもある。

出発公式

アダムス法はいくらでも高次の公式が作れ、計算量もあまり多くないということがわかっているが、必ずしも広く使われているというわけでもない。その理由はいろいろあるが、一つは、

「どうやって計算を始めるべきかよくわからない」

ということ。

初期値問題としてはもちろん t_0 におけるx_0しか知らない

多段階法ではその前の時刻での解が必要

なんらかの方法で与える:面倒

陰的アダムス法

陰的な補間多項式、つまり t_{i+1}での関数の値を使った公式を考える。

刻み hが定数であるとすれば、pを決めれば前と同様に

$$x_{i+1} = x_i + h \sum_{l=-1}^{p-1} b_{pj} f_{i-l} \tag{61}$$

の形に書けることになる。また手をぬいて $p=1$の場合を考えれば、これは単に台形公式

$$x_{i+1} = x_i + \frac{h}{2}(f_i + f_{i+1}) \tag{62}$$

となる。

代数方程式の解きかた

通常の方法

- 初期値として同じ次数の陽的アダムス法の解を持ちいる。
- そのあとは直接代入法で反復する。

というものである。

なお、このやり方を、予測子・修正子法と呼ぶ。線形多段階法はほとんどこの形で使われるため、線形多段階法のことをさして予測子・修正子法と呼ぶ人もいる。

反復回数

収束まで繰り返す必要はないことに注意。

例えば、予測-加速度計算-修正 (PEC) とするだけでも、予測-加速度計算 (PE) だけよりも精度が上がる。それ以上反復を繰り返しても大して精度は上がらない。

場合によっては $\mathrm{P(EC)}^2$ や $\mathrm{PE(CE)}^2$ といった方法も使われる。

時間刻みを変える時

時間刻み一定:あらかじめ係数を求めておいて、前の関数値の線形結合で計算できる。

刻みを変えたい場合:

もっとも一般的で強力な方法は、補間多項式を計算し、さらにそれを現在の時間刻みで積分した形の係数を求める、すなわち、毎回積分公式を作り直すという方法。

大変そうに聞こえるけどそれほどでもない。細かい話は省略。

計算中の誤差評価

誤差評価はルンゲ・クッタに比べて容易。

予測子・修正子型の公式の場合、この2つの間の差がかなり良い誤差の推定値 (もちろん大きめだが) になっているので、これを使ってやればいい。

ルンゲ・クッタとの比較

必要な精度を決めた時、ほとんどどんな場合でも、線形多段階法のほうがルンゲ・クッタ法よりも少ない計算量で答を得ることが出来る

(実験的にも、また誤差の係数をつかった理論的な解析からも)

ルンゲ・クッタ公式が優れているのは、基本的にはその使いやすさにおいてのみ

使いやすさというのは実際的にはなかなか重要

2階の方程式向けの方法

ハミルトン系のような2階の方程式の場合:

アダムス型公式をそのまま使うのは賢くない

アダムス法の場合、加速度に対する補間多項式を2回積分すれば位置の変化が求まる。

速度についての補間多項式を構成したり、速度の昔の情報をとっておく必要はない。

必要なメモリ、計算量の両方が減る。

エルミート公式

良く研究されている解法:

微分方程式を与えられたものと考え、その右辺値、つまり導関数だけを使って積分公式を構成する。

ある意味素直な方法:高次の導関数も使う。

どんどん次数をあげると計算量が指数関数的に上昇するのであまり現実的な方法ではない

次の導関数くらいならそれほど大変ではない

重力の場合

2体間の重力

$$\boldsymbol{f}_{ij} = -Gm_j\frac{r_i - r_j}{r_{ij}^3} \tag{63}$$

なら、その一階導関数は

$$\boldsymbol{j}_{ij} = -Gm_j\left[\frac{\mathrm{v}_{ij}}{r_{ij}^3} - \frac{3(\mathrm{v}_{ij}\cdot\mathrm{r}_{ij})\mathrm{r}_{ij}}{r_{ij}^5}\right], \tag{64}$$

である。ここで

$$r_{ij} \ = x_j - x_i, \tag{65}$$

$$v_{ij} \ = v_j - v_i. \tag{66}$$

であり、 x_i、v_i はそれぞれ粒子 i の位置、速度、G は重力定数、m_j は粒子 j の質量である。

一階導関数の利用

アダムス法を拡張して、補間多項式を導関数も使って構成

この型の補間自体: エルミート補間

積分公式は、人によってエルミート型、あるいはオブレヒホフ型の公式と呼ばれる。

利点:段数に対して達成出来る多項式の次数が 2 倍。

特に、実質的には 1 段法である 2 段の陰的公式で 4 次精度が出来る。

さらに、予測子を加速度の導関数まででとめてしまえば予測子も 1 段法になって実装が簡単。(出発公式不要)

エルミート公式:予測子

予測子は単に以下のようなテイラー展開で与えられる。

$$x_\mathrm{p} = \frac{\Delta t^3}{6}\dot{\mathrm{a}}_0 + \frac{\Delta t^2}{2}a_0 + \Delta t v_0 + x_0 \tag{67}$$

$$v_\mathrm{p} = \frac{\Delta t^2}{2}\dot{\mathrm{a}}_0 + \Delta t a_0 + v_0, \tag{68}$$

ここで x_p と v_p はそれぞれ位置と速度の予測子であり、x_0, v_0, a_0 および $\dot{\mathrm{a}}_0$ は前の時刻での位置、速度、加速度と加速度の一階時間導関数である。Δt は時間刻み $t_1 - t_0$ である。

エルミート公式:修正子

$$x_\mathrm{c} = x_0 + \frac{\Delta t}{2}(v_\mathrm{c} + v_0) - \frac{\Delta t^2}{12}(a_1 - a_0), \tag{69}$$

$$v_\mathrm{c} = v_0 + \frac{\Delta t}{2}(a_1 + a_0) - \frac{\Delta t^2}{12}(\dot{\mathrm{a}}_1 - \dot{\mathrm{a}}_0). \tag{70}$$

となって非常に簡単に 4 次精度の公式を作れる。

重力多体系の計算では割合一般的に使われている (と思う)。

独立時間刻み

重力多体問題: 原理的には単に大規模な常微分方程式の初期値問題

ナイーブに考えると、今まで議論してきたいろんな公式がライブラリであるので、それを使えば済みそうな気がする。

それだけで済むならこの講義の半分はいらない。

済まない理由:

- 粒子によって非常に大きく軌道のタイムスケールが違うことがある
- 連星とかそういったものができる

軌道タイムスケールの問題

- 構造形成による効果
- 一様な系でも起きる問題

構造形成による効果

自己相似的なコラプス:

$$\begin{aligned} \rho &\propto r^{-\alpha} \\ \sigma &\propto r^{(2-\alpha)/2} \end{aligned} \tag{71}$$

軌道タイムスケール: $1/\sqrt{G\rho} \sim r^{\alpha/2}$

コアが収縮するにつれてその力学的タイムスケールはどんどん短くなる。

一様な系でも起きる問題

重力が引力であるために確率的には2つの粒子がひじょうに近付くような近接散乱が起こる

インパクトパラメータが 0 に近い2体衝突: 非常に短い時間刻みが必要

これは重力多体系特有の問題: 相互作用が引力で、しかも距離 0 で発散するため。

例えば分子動力学計算ではこういう問題はおこらない。

計算量への影響

単純な可変時間刻みでは計算量が大きくなる。

理由:

どちらの場合も、タイムステップの分布がべき乗的なテイルをもつようになる。

このため、粒子数が増えるに従って、タイムステップが短くなる。

構造形成の効果: 最悪 $O(N)$

2体衝突の効果: $O(N^{1/3})$ 程度

対応

- 粒子毎に時間刻みをバラバラに変化させる。(独立時間刻み)
- 2体衝突、連星は座標変換して扱う。

例

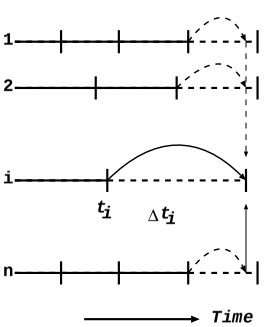
10 体問題の例 — デモ計算

独立時間刻みの原理

粒子毎にばらばらの時刻 t_i と時間ステップ Δt_i を与える

1. $t_i + \Delta t_i$ が最小の粒子を選ぶ。
2. その粒子の軌道を新しい時刻まで積分する。
3. その粒子の新しい時間刻みを決める。
4. ステップ 1 に戻る。

問題:ある粒子の時刻 $t_i + \Delta t_i$ で他の粒子の位置が必要



他の粒子の位置の計算

時間刻み可変の「予測子」を使えば問題ない

つまり、

- 各粒子の時間積分公式としては、可変ステップの線形多段階法をPEC モードで使う。
- ある粒子の新しい時刻での加速度を計算するには、他の粒子のその時刻での位置を予測子を使って予測する。

ということになる。

時間刻み自体の決定

伝統的には、以下のなんだか意味が良くわからない形の式が使われている。

$$\Delta t = \sqrt{\eta \frac{|a_1||\mathrm{a}_1^{(2)}| + |\dot{\mathrm{a}}_1|^2}{|\dot{\mathrm{a}}_1||\mathrm{a}_1^{(3)}| + |\mathrm{a}_1^{(2)}|^2}} \tag{72}$$

時と場合に応じて考える必要あり。

積分公式再考

連星、階層3重星のような長時間積分が必要な系: 特殊な公式を使ってでも計算時間を短くしたい。そういうものはないか?

- シンプレクティック型公式
- 対称型公式

ハミルトン系/周期軌道に対して特別に良い性質をもつ

「良い」公式の古典: 2 次 leap frog

昔からいろんな業界で使われていて、名前が違う、、、

- leapfrog
- Verlet
- 2nd order ABM
- 2nd order Stömer-Cowell

他にも4個くらい名前があったような。

leap frog 公式

$$v_{i+1/2} = v_{i-1/2} + \Delta t a(x_i) \tag{73}$$
$$x_{i+1} = x_i + \Delta t v_{i+1/2} \tag{74}$$

ここで、添字はステップである。 $\pm 1/2$ は中間点での値ということになる。

出発用公式として

$$v_{1/2} = v + \Delta t a(x_0)/2 \tag{75}$$

を使い、さらに終了用公式として

$$v_i = v_{i-1/2} + \Delta t a(x_i)/2 \tag{76}$$

を使う

別の表現

$$x_{i+1} = x_i + \Delta t v_i + \Delta t^2 a(x_i)/2 \tag{77}$$
$$v_{i+1} = v_i + \Delta t [a(x_i) + a(x_{i+1})]/2 \tag{78}$$

こう書くと PC 法みたいに見える。また、以下のようにも書ける

$$v_{i+1/2} = v_i + \Delta t a(x_i)/2 \tag{79}$$
$$x_{i+1} = x_i + \Delta t v_{i+1/2} \tag{80}$$
$$v_{i+1} = v_{i+1/2} + \Delta t a(x_{i+1})/2 \tag{81}$$

これは一見なんだか良くわからない。さらにまた、速度を消去して x_{i-1}, x_i, x_{i+1} の関係式の形で書いてあることもあるかもしれない。

leap frog の性質

普通にいう 2 次精度である。

局所誤差という観点からはこれは決して良い公式というわけではないが、現実にはこの公式は非常に広く使われている。

実際、非常に「良い」例えばエネルギーや角運動量のような保存量が非常によく保存するということである。これらの保存量については多くの場合に誤差がある程度以上増えない。

1. リープフロッグはシンプレクティック公式 のもっとも簡単なものの一つである。
2. リープフロッグは対称型公式 のもっとも簡単なものの一つである。

シンプレクティック公式の性質

1. シンプレクティック公式は、すくなくともある種のハミルトニアンに対して使った場合に、それに近い別のハミルトン系に対する厳密解を与えることがある。
2. 周期解を持つハミルトン系に対して使った場合に、どんな量でも誤差が最悪で時間に比例してしか増えない。
3. 時間刻を変えると上のようなことは成り立たなくなる

対称型公式の性質

1. 周期解を持つ時間対称な系に対して使った場合に、どんな量でも誤差が最悪で時間に比例してしか増えない。
2. 時間刻を変えてもうまくいくようにすることも出来る。

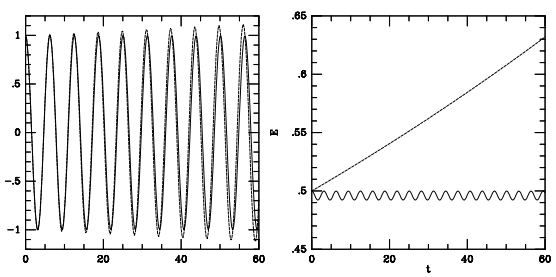
数値例

調和振動子

$$\frac{d^2x}{dt^2} = -x \tag{82}$$

を リープフロッグ と 2 階のルンゲクッタで解いてみる。初期条件は $(x, v) = (1, 0)$ で、時間刻みは $1/4$ である。

軌道とエネルギー



保存量

この調和振動子の場合には、リープフロッグ公式は以下の量

$$H' = \frac{1}{2}(x^2 + v^2) - \frac{h^2}{4}x^2 \tag{83}$$

を保存する。

つまり、微妙に浅いポテンシャルでの調和振動子になっている。

$h \geq 2$ になるとポテンシャルが下に凸でなくなる。

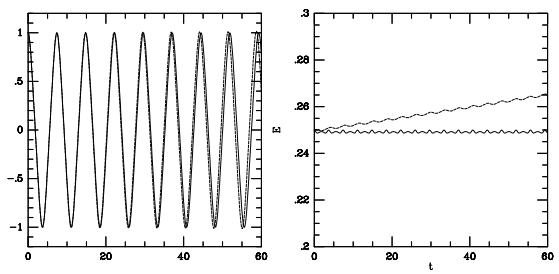
これは、安定でなくなる (差分方程式の固有の絶対値が 1 でなくなる) のと一致している。

非線形振動

$$\frac{d^2x}{dt^2} = -x^3 \tag{84}$$

をリープフロッグと 2階のルンゲクッタで解いてみる。初期条件は $(x, v) = (1, 0)$ で、時間刻みは $1/8$ である。

軌道とエネルギー



シンプレクティック公式

リープフロッグ 公式は、良いけど低次。

もっと高次の方法は?

そういうのを作る一つのアプローチ:シンプレクティック公式

シンプレクティック写像:要するに正準変換

リープフロッグ公式はシンプレクティック性を満たしている

これを時間刻みを変えて組合せたものもシンプレクティック性を満たしている

陽解法

吉田や鈴木による作用素分解に基づく公式が良く知られていて、広く使われている。

これらの方法の原理:

- リープフロッグをタイムステップを変えていくつか組合わせる。
- うまくタイムステップを組み合わせると誤差の高次の項を消すことができる

7段6次や15段8次の公式等が吉田によって導かれている。

陽解法はハミルトニアンが $T(p) + V(q)$ の形の場合にしか使えない

陰解法

遠い昔にでてきた陰的ガウスはシンプレクティック。

シンプレクティック公式の意味

シンプレクティックであるということと、「良い」ということの間の関係はなにか?

あるハミルトニアン H で表される系をシンプレクティックな p 次の公式を使って積分した解は、別のハミルトニアン H' で与えられるシステムの厳密解になっていて、H と H' の間に

$$H = H' + h^{p+1}H_p + O(h^{p+2}) \tag{85}$$

という関係がある (H'を求める数列が収束すれば) ということがわかっている。

(収束するかどうかは一般には明らかではない)

シンプレクティック公式と可変時間刻み

適当に時間刻みを変えると上手く働いてくれない (エネルギーとか保存しなくなる)

以下のような考えかたでの研究が進められている。ハミルトニアン H を

$$H = H_1 + H_2 + \cdots \tag{86}$$

と複数の項の和にわけ、それぞれについて違う時間刻みを与えることで実効的に時間刻みを変える。

局所誤差

シンプレクティック公式は1段法:局所誤差に対する計算量という観点からは線形多段階法に比べて必ず悪い

普通の (誤差を小さくした) ルンゲ・クッタに比べても驚くほど悪い

例:8 次の公式

15 段の吉田による公式の誤差の係数は、2 階の問題に最適化された非シンプレクティックな Dormand らによる 9 段公式 (実質 8 段 8 次) の 10^4 倍

同じ計算時間での局所誤差は100万倍

局所誤差の小さい公式

陰的ガウスはいろいろな意味で「最適」な公式であり、局所誤差も極めて小さい。

直接代入で収束させても、他の方法より速いという実験結果もある。

MVS公式等

「ハミルトニアンの分離」の考え方を、主要なハミルトニアン+摂動の系 (例えば摂動があるケプラー問題) に適用する。

リープフロッグとの基本的な考え:

$$H = T(p) + V(q) \tag{87}$$

に対して、pに対する以下の変換

$$p \leftarrow p - \Delta t \frac{\partial H}{\partial q} \tag{88}$$

と q に対する同様な変換がそれぞれシンプレクティックなので、それらを順番に適用したものもシンプレクティックになるというもの。

摂動ケプラー問題

摂動をうけたケプラー問題のハミルトニアン:

$$H = T(p) + V_1(q) + V_2(q) \tag{89}$$

惑星系なら V_1 が太陽からの重力で、 V_2 は自分以外の惑星からの寄与。

このとき

$$H_1 = T(p) + V_1(q) \tag{90}$$

の解はそれ自体シンプレクティックであり、また V_2 だけを考えた

$$p \leftarrow p - \Delta t \frac{\partial V_2}{\partial q} \tag{91}$$

というマッピングもシンプレクティックである。従って、この2つを組み合わせて積分公式をつくることができる。

解釈

リープフロッグ: $x \leftarrow x + \Delta t v$ と直線で動かす

MVS: ポテンシャル V_1 に沿って動かす

ケプラー問題は解析的に解けるので、このようなやり方で太陽中心の軌道を極めて高精度に積分できる。

実用的にこの方法を使うためには、ケプラー問題を高速に解く方法が必要になる。これは、実空間でまともに解く方法と、KS 変換した座標系で解く方法のそれぞれで極めて高速に解ける方法が提案されている。

対称型公式

(ここでの) 時間反転に対する対称性とは、常微分方程式

$$\frac{dy}{dx} = f(x, y) \tag{92}$$

に対する一段法

$$y_{i+1} = F(x_i, y_i, f, \Delta x) \tag{93}$$

が、

$$y_i = F(x_{i+1}, y_{i+1}, -f, \Delta x) \tag{94}$$

を満たすこと、つまり、直観的には、ある微分方程式系があって、それを1ステップ分数値的に軌道を進めたとする。で、そこから逆に戻ると厳密に元の値に戻るということ。

具体例

前進オイラー法は対称型ではない。

その逆写像である後退オイラー法も対称型ではない。

台形公式

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2}(f_i + f_{i+1}) \tag{95}$$

は対称。

対称形公式の利点

- ハミルトン系に対して対称型公式を使った場合、エネルギーや角運動量などの保存量の誤差がある範囲内にとどまる
- 時間刻みを変えても上の性質を保つことが出来る

前のほうの性質はシンプレクティック公式と同じであるが、後の方の性質はシンプレクティック公式よりもある意味でよいものである。

陰公式か陽公式か

一階の方程式に対する一段法という制限をつけた場合:対称な公式はかならず陰的公式

陰的ガウス法は対称型公式でもある。

一階の系に対する通常の一段法では、これよりよい方法は多分ない。それでは、

- ハミルトン系専用の解法ではどうだろうか
- 多段法ではどうなっているのだろう
- それ以外の方法はないのだろうか

以下、順番に考えていくことにする。

ハミルトン系用の陽的対称型RK公式

リープフロッグ公式は対称型でありしかも陽公式である。で、リープフロッグの組合わせで作られる公式も、実はすべて対称型になっている。

対称型線形多段法

一段法という枠を外してみる=線型多段法を考える。

線形多段階法の対称性を以下のように定義しておく。

2階の方程式用の線形多段階法の一般形:

$$\alpha_0 x_{i+p} + \cdots \alpha_p x_i = h^2(\beta_0 f_{i+p} + \cdots \beta_p f_i) \tag{96}$$

$\beta_0 = 0$ なら陽的、そうでなければ陰的公式

対称型であるとは、係数が

$$\alpha_i = \alpha_{p-i}, \quad \beta_i = \beta_{p-i} \tag{97}$$

を満たすということ。

リープフロッグをこの形にしたものは、

$$x_{i+1} - 2x_i + x_{i-1} = h^2 f_i \tag{98}$$

注意

係数が対称という意味で対称な公式は、実際に時間反転に対して対称といえる。

$(x_i, ...x_{i+p-1})$ から上の式で x_{i+p} を求めたとする。時間を逆転させた解を考えて、$(x_{i+p}, ...x_{i+1})$ から x_i を求めるということを考えても、使う式が時間が逆転していないものと同じになっているのである。

歴史

公式が存在することは 1970 年代から知られていた

注目されるようになったのはシンプレクティック法の研究が盛んになった 1990 年代に入ってから。特にトロント大の Quinlan と Tremaine が 14 次までの対称型公式を導いた。

さらに最近になって、国立天文台の福島によって、Quinlan & Tremaine によるものよりもはるかに良い性質を持つものが導かれている。

問題点

これらの公式に共通する欠陥: 6 次以上の公式は線形解析では安定であっても、非線形問題 (例えば、単純なケプラー問題) に適用すると共鳴により不安定な振動を起こす。

このために 6 次以上の公式は現在のところ実用になっていない。

まとめ

というものは特にないですが、まあ、このあたりで。