常微分方程式の数値計算

牧野淳一郎
神戸大学理学部惑星学科 計算惑星

2025 年 9 月 15 日

大体の講義計画

- 常微分方程式の数値積分法の概要
- NEMO を使った実習

より詳しく資料 (教科書以外/元ネタ)

http://grape.mtk.nao.ac.jp/pub/people/makino/kougi/stellar_dynamics/index.html
http://grape.mtk.nao.ac.jp/pub/people/makino/talks/index-j.html

等を見てくださいな。もっとだらだら書いてある

http://www.artcompsci.org

というのもあります。

常微分方程式の数値積分

- 代表的な積分公式
  - ルンゲ・クッタ
  - 線形多段階法
  - 外挿法
- 数値解の安定性
- シンプレクティック公式と時間対称型公式
- まとめ

常微分方程式の数値解法の概要

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)

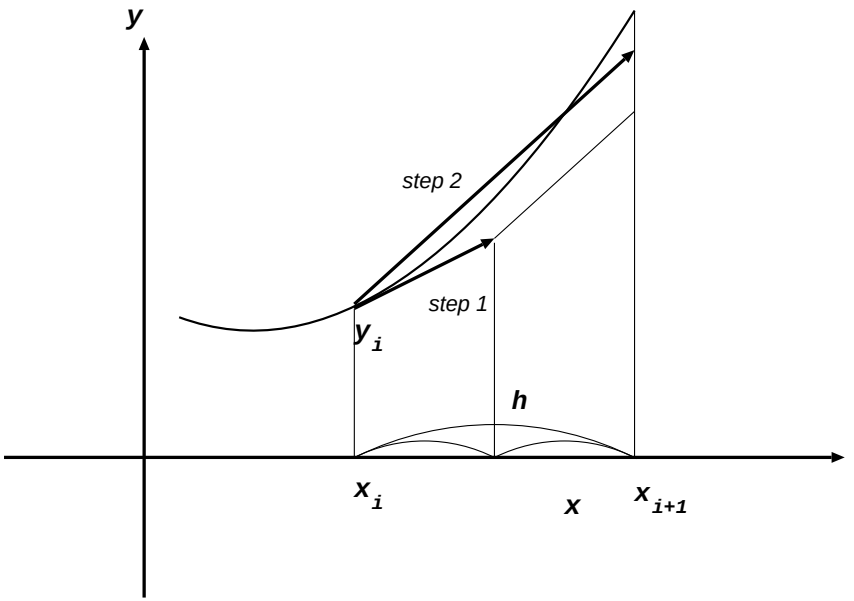
ルンゲ・クッタ

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

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



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

$$
\begin{aligned}
x_{n+1} &= x_n + h \sum_{i=1}^{s} b_i k_i \\
k_i &= f(x_n + h \sum_{j=1}^{s} a_{ij} k_j, t_n + c_i h) \qquad (2)
\end{aligned}
$$

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

$$
c_i = \sum_{j=1}^{s} a_{ij} \qquad (3)
$$

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

$$
\begin{aligned}
x_{n+1} &= x_n + h(k_1 b_1 + k_2 b_2) \\
k_1 &= f(x_n + h(a_{11}k_1 + a_{12}k_2), t_n + c_1 h) \\
k_2 &= f(x_n + h(a_{21}k_1 + a_{22}k_2), t_n + c_2 h) \qquad (4)
\end{aligned}
$$

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、

$$
\begin{aligned}
x_{n+1} &= x_n + h(k_1/6 + k_2/3 + k_3/3 + k_4/6) \\
k_1 &= f(x_n, t_n) \\
k_2 &= f(x_n + hk_1/2, t_n + h/2) \\
k_3 &= f(x_n + hk_2/2, t_n + h/2) \\
k_4 &= f(x_n + hk_3, t_n + h)
\end{aligned} \tag{5}
$$

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

$$x_{n+1} = x_n + \sum_{i=1}^{s} b_i k_i \tag{6}$$

k_i は全部そのまま使って、 b_i を別の b'_i に置き換える

$$x' = x_n + \sum_{i=1}^{s} b'_i k_i \tag{7}$$

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。

ガウス型数値積分

ガウス型公式について述べる前に、まずそれと非常に関係の深い数値積分公式について。

数値積分: $y = f(x)$ に対して、

$$\int_{t_s}^{t_e} f(x)dx \tag{8}$$

を数値的に求める。

たとえば

- 台形公式
- シンプソン公式
- ロンバーグ加速

台形公式

$$s_i = \frac{h[f(x_i) + f(x_{i+1})]}{2} \tag{9}$$

と、両端を結んだ台形の面積で近似するということに相当する。

もっとましな方法

- 一つの区間の中で複数点をとり、補間多項式を作る

- 区間の端を含むか？
- 等間隔か？

端を含む等間隔補間: p 個に分割した時に、多項式次数は p 次、1区間の積分精度は $h^{(p+1)}$

「最良の」数値積分法？

理屈は省略。

「ガウス・ルジャンドルの多項式の零点を補間点にとると、次数を最大にできる」

この時、p 点での数値積分の次数: $2p+1$。(固定区間では $2p$)

微分方程式への積分公式の適用

中点公式の場合: 数値積分は単に

$$S = hf((x_0 + x + 1)/2) \tag{10}$$

$(t_0 + t_1)/2$ での x の値 ??

近似:

$$\hat{x}(t) = x_0 + f(\hat{x}(t_0 + h/2), t_0 + h/2)(t - t_0) \tag{11}$$

中点での値:

$$x_{1/2} = x_0 + f(x_{1/2}, t_0 + h/2)h/2 \tag{12}$$

これは $x_{1/2}$ に対する代数方程式

一般の場合

一般の多項式 L_{n-1}、零点 t_k:

$$x_k = x_0 + \int_{t_s}^{t_k} L_{n-1}(t)dt, \quad k = 1, 2, ...n \tag{13}$$

と

$$L_{n-1}(t_k) = f(x_k, t_k), \quad k = 1, 2, ...n \tag{14}$$

がなり立つように x_k と L を決め、それを積分して t_e での解が求まる。

係数をあらかじめ計算しておけば上の手続きが陰的ルンゲクッタ公式のできあがり。 4 段で 8 次の公式

代数方程式の扱い

代数方程式といっても、ここで扱うものはほとんど必ず

$$x = f(x) \tag{15}$$

ある関数の不動点を求めるという形

直接代入法

$$x_{new} = f(x_{old}) \tag{16}$$

プログラミング簡単。実際に結構使われる。

理論的には、

- 収束するかどうか？
- 収束の速さ？

「硬い」方程式の時には収束しない。ニュートン法が必要。

ガウス型以外の陰的公式

陰的ガウス公式は、実用上はいろいろ不便な点もある。例えば、

- 最小の段数で最高の次数（精度）を達成しているので、係数に自由度がなくいわゆる「埋め込み型」の公式が構成できない。
- 端の点を使わないので、前のステップでの計算結果の再利用が出来ない。
- 完全陰的法なので、計算が大変である

などの問題がある。それぞれの点について改良された沢山の方法が知られている。

線形多段階法

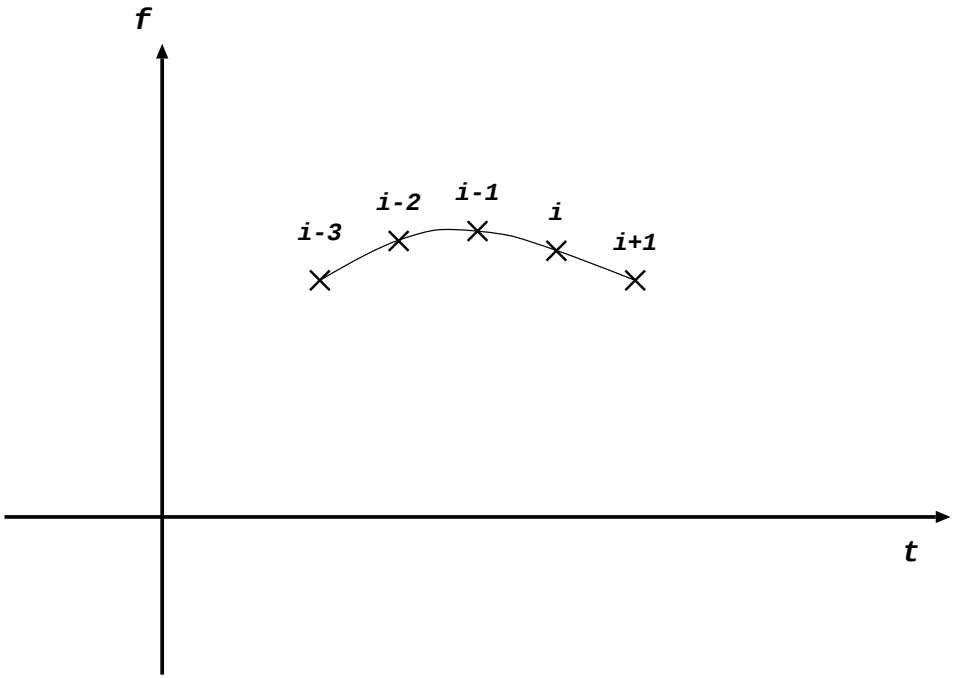
ルンゲ・クッタ法:「一段階法」t_i における解 x_i がわかっていれば、それだけから次の時刻 t_{i+1} での解 x_{i+1} が求まる。

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

$$P(t_j) = f_j = f(x_j, t_j) \quad (i-p \leq j \leq i) \tag{17}$$

を満たすものを作る。で、$i+1$ での解 x_{i+1} は

$$x_{i+1} = x_i + \int_{t_i}^{t_{i+1}} P(t)dt \tag{18}$$

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

$$x_{i+1} = x_i + h \sum_{l=0}^{p} a_{pj} f_{i-l} \tag{19}$$

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

$$P(t) = f_i - \frac{f_{i-1} - f_i}{h}(t - t_i) \tag{20}$$

となって、これを積分すれば、結局

$$x_{i+1} = x_i + \frac{h}{2}(3f_i - f_{i-1}) \tag{21}$$

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。

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

$$x_{i+1} = x_i + h \sum_{l=-1}^{p-1} b_{pj} f_{i-l} \tag{22}$$

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

$$x_{i+1} = x_i + \frac{h}{2}(f_i + f_{i+1}) \tag{23}$$

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。

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

低い次数から始める: 時間刻み変える必要あり: やっぱり面倒

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面倒なだけで難しいわけではない。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。

外挿法

外挿法の考え方:

- 同じ区間を、刻み幅を変えて何回か積分する。
- それらの解から、刻み幅0の極限を推定(外挿)する。

数値積分における外挿

例えばある刻み幅 h_1 と、別の刻み幅 h_2 で計算した答の誤差は、それぞれ、ある（共通の）定数 C を使って

$$\begin{aligned} e_{h1} &= Ch_1^2 \\ e_{h2} &= Ch_2^2 \end{aligned} \tag{24}$$

と書けるような気がする。これをさらに言い換えると、積分の近似値 $S(h)$ が、真の値 S を使って

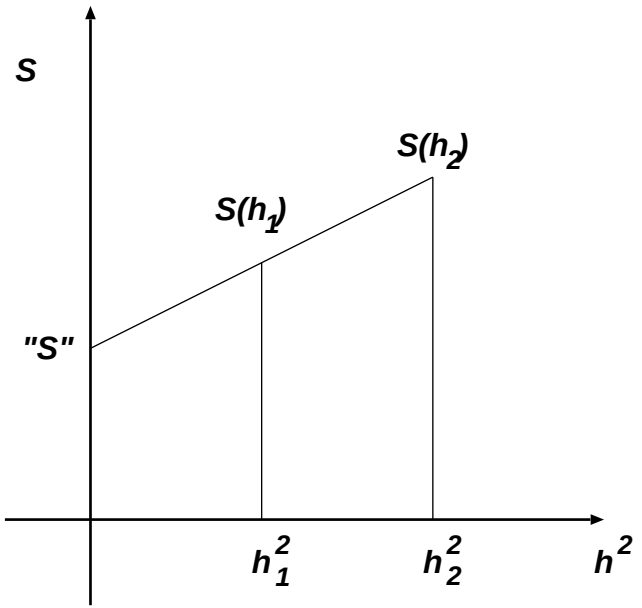
$$\begin{aligned} S(h_1) &= S + Ch_1^2 \\ S(h_2) &= S + Ch_2^2 \end{aligned} \tag{25}$$

と書けるはずということになる。

外挿の続き

$$S = \frac{h_2^2 S(h_1) - h_1^2 S(h_2)}{h_2^2 - h_1^2} \tag{26}$$

図にするとこんな感じかな：



外挿の精度

もちろん、外挿で本当の真の値が求まるわけではない。具体的に次の項を考えてみると、

$$\begin{aligned} S(h_1) &= S + C_2 h_1^2 + C_4 h_1^4 \\ S(h_2) &= S + C_2 h_2^2 + C_4 h_2^4 \end{aligned} \tag{27}$$

と書けるとすれば、これから求めた「真の値」は

$$S' = S - C_4 h_1^2 h_2^2 \tag{28}$$

となって、結局 4 次にしかなっていないということがわかる。

なお、ここで 2 次の項の次が 3 次ではなくて 4 次になるとしたが、これは台形公式でも中点公式でもなりたつ性質である。

これをもっと沢山 h を変えて、どんどん高次に、というのが外挿法である。

ロンバーグ加速

数値積分の場合にもっとも普通に使われるのは、台形公式とリチャードソン補外の組合わせであり、これにはロンバーグ積分法という特別な名前がついている。ロンバーグ法の場合、h を半分にしていく。これは、台形公式では h を半分にした時に、元の h で計算した値はそのまま使えるので、計算量が得になるからである。結局、普通の台形公式と同じ計算量ではるかに高い計算精度が達成できることになる。

グラッグ法

リチャードソン補外の考えを常微分方程式に適用しようというのがグラッグ法である。以下のことに注意したい：

- 台形公式は陰的公式になってしまうので、あまり使いたくない
- 数値積分の場合と違って、刻みを半分にしても前の値は使えない

これらの問題のために、常微分方程式に対して補外法が使えるということが初めて示されたのは 1965 年と比較的最近のことである。（線形多段階法やルンゲ・クッタ法は19世紀から使われている）

陽的中点公式

陽的な公式で、誤差に奇数次の項がないものの例:

$$x_{i+1} = x_{i-1} + 2hf(x_i, t_i) \tag{29}$$

線形多段階法の一つである。これと、前進オイラー法による出発公式

$$x_1 = x_0 + hf(x_0, t_0) \tag{30}$$

を組み合わせたものは（ステップ数が偶数なら)）、h^2 による漸近展開をもつことが知られている。従って、この組合せを使うと、リチャードソン補外によって超高精度の積分公式を作れる。これを通常グラッグ法と呼ぶ。

他の方法との優劣

これは実は非常に難しい問題で、まだ良くわかっていない。適当な本には、「低い精度ならば４次の古典的ルンゲクッタ、そうでない時には外挿法がもっともよい」なんて書いてあることもあるが、実際問題としては外挿法が有利になるほど高い精度が必要になることは稀であり、高次のルンゲクッタや線形多段階法のほうが優れていることも少なくない。

微分方程式と数値解の安定性

微分方程式の安定性とは？

$$\frac{dy}{dx} = f(x, y) \tag{31}$$

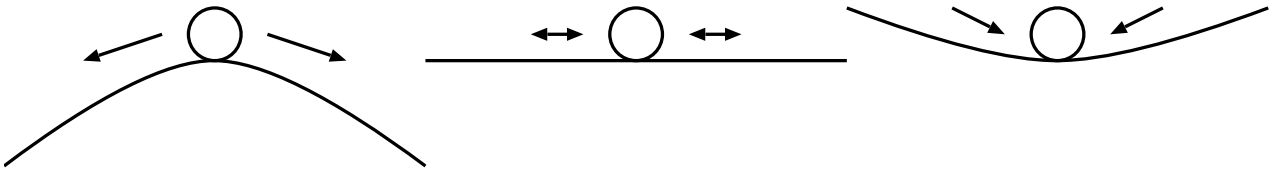
定常解の局所的安定性:

$$f(y_0) = 0 \tag{32}$$

(x に導関数が依存しないとして) である解が安定:

「なんらかの理由（外乱とか）で、定常解から少し離れたところに解がいった時に、もとの解にもどる」

安定性



こんな感じ

これは、結局、定常解の周りで線形近似した方程式を

$$\frac{dy}{dx} = \lambda y$$

と書くとき、 λ (行列なら固有値) が負である、ということ。

陽的オイラー法の安定性

一変数線形常微分方程式

$$y' = \lambda y \quad (\lambda < 0) \tag{33}$$

を、前進（陽的）オイラー法

$$y_{i+1} = y_i + h y'|_{y=y_i} \tag{34}$$

で積分する場合を考えてみる。すぐにわかるように、

$$y_{i+1} = y_i(1 + h\lambda) \tag{35}$$

から、

$$y_n = y_0(1 + h\lambda)^n \tag{36}$$

となる。

陽的オイラー法の安定性(続き)

安定であるとは $n \to \infty$ で $y_n \to 0$ となることであるから、その条件は

$$|1 + h\lambda| < 1 \tag{37}$$

つまり

$$h < -\frac{2}{\lambda} \tag{38}$$

ということになる。

すこし考えてみるとすぐにわかるように、$h\lambda < -1$ の数値解は解としてはむちゃくちゃなものであるが、まあ、それでも安定ではある。

陽的オイラー法の安定性(多変数)

多変数でも、対角化すれば同じ。固有値が複素数になりえるので、通常、$\bar{h} = h\lambda$ とおいてこれがどういう範囲であれば安定かという議論をする。

複素数の固有値のときは、複素平面上で考えると、$\bar{h}$ が中心 $(-1, 0)$、半径 1 の円の内部で安定ということになる。なお、上のような、元の方程式に安定解がある時に数値解がそこにいくという性質を、特に「絶対安定性」ということがあり、$\bar{h}$ の複素平面上で絶対安定である領域のことを絶対安定領域という。

後退オイラー法の安定性

後退（陰的）オイラー法

$$y_{i+1} = y_i + hy'|_{y=y_{i+1}} \tag{39}$$

で積分する場合を考えてみる。すぐにわかるように、

$$y_{i+1} = y_i \frac{1}{1 - h\lambda} \tag{40}$$

から、

$$y_n = y_0(1 - h\lambda)^{-n} \tag{41}$$

となる。$\lambda < 0, h > 0$ なので $|1 - h\lambda| > 1$ であり、後退オイラー法の絶対安定領域は左半平面全体であるということがわかる。言い替えれば、

後退オイラー法は数値不安定を起こすことはない。

線形多段階法の安定性に関する一般論

一般に線形多段階法についてはオイラー法と同様な扱いができる。つまり、使う公式を決めたら、それで一変数線形の方程式を解いて見る。すると、それが一般に $y_n = \xi^n$ の形をとる。ξ は、安定性多項式と呼ばれる、要するに y_i を ξ^i で置き換えてできる代数方程式の根である。このとき、絶対安定である条件は、すべての ξ の絶対値が 1 より小さいということになる。

線形多段階法の安定性:例

例えば、前回の補外法のところで出てきた中点公式

$$y_{i+2} = y_i + 2hf(x_{i+1}, y_{i+1}) \tag{42}$$

を考えてみよう。安定性多項式は

$$\xi^2 - 2\bar{h}\xi - 1 \tag{43}$$

となり、実解が2つある。すぐにわかるように、 $\bar{h} \neq 0$ ならば必ず解の一つは絶対値が 1 より大きいので、中点公式には絶対安定領域がない、言い替えればかならず不安定であるということがわかる。

これにたいし、アダムス法はちゃんと絶対安定領域を持つ。但し、次数が上がるにつれて小さくなるし、陽公式の安定領域は陰公式のそれよりもずっと狭い。

陽的ルンゲ・クッタ公式の安定性

ルンゲ・クッタ公式についても、線形多段階法の場合と同様に絶対安定領域を求めることが出来る。陽的公式については、以下の面白い結果が知られている

- ４次までの公式（段数と次数が等しいもの）の絶対安定領域は、次数だけで決まる。
- ４次まででは高次の公式のほうが安定領域が広い。

特に、３次以上の公式では、絶対安定領域が右半平面に張り出す。これは、言い替えれば、本当なら振動的に発散するか一定振幅で無限に振動するはずの系が、数値解では振動的に収束するということであって必ずしも正しい振舞いというわけではないが、それでいいような場合も多い。

陰的ルンゲ・クッタ公式の安定性

陰的ルンゲクッタについては、陽的公式よりもはるかに強い結果が得られている:陰的ガウス公式の安定領域は、左半平面全体である。また、Radau 公式のような、もっと広い安定性領域を持つものも知られている。

これは、陰的公式、とくに full-implicit な公式の重要な利点の一つである。

補外法の安定性

良くわかっていない。h のとりかたを決めれば、ルンゲ・クッタの一種とみなせるので、そういう研究はある。具体例では、割と狭いという結果が得られているようである。

ハミルトン系に適した公式はないか？

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

$$v_{i+1/2} = v_{i-1/2} + \Delta t a(x_i) \tag{44}$$

$$x_{i+1} = x_i + \Delta t v_{i+1/2} \tag{45}$$

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

$$v_{1/2} = v + \Delta t a(x_0)/2 \tag{46}$$

を使い、さらに終了用公式として

$$v_i = v_{i-1/2} + \Delta t a(x_i)/2 \tag{47}$$

を使う

別の表現

$$x_{i+1} = x_i + \Delta t v_i + \Delta t^2 a(x_i)/2 \tag{48}$$

$$v_{i+1} = v_i + \Delta t[a(x_i) + a(x_{i+1})]/2 \tag{49}$$

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

$$v_{i+1/2} = v_i + \Delta t a(x_i)/2 \tag{50}$$

$$x_{i+1} = x_i + \Delta t v_{i+1/2} \tag{51}$$

$$v_{i+1} = v_{i+1/2} + \Delta t a(x_{i+1})/2 \tag{52}$$

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。

理由:非常に「良い」性質を持つ。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。

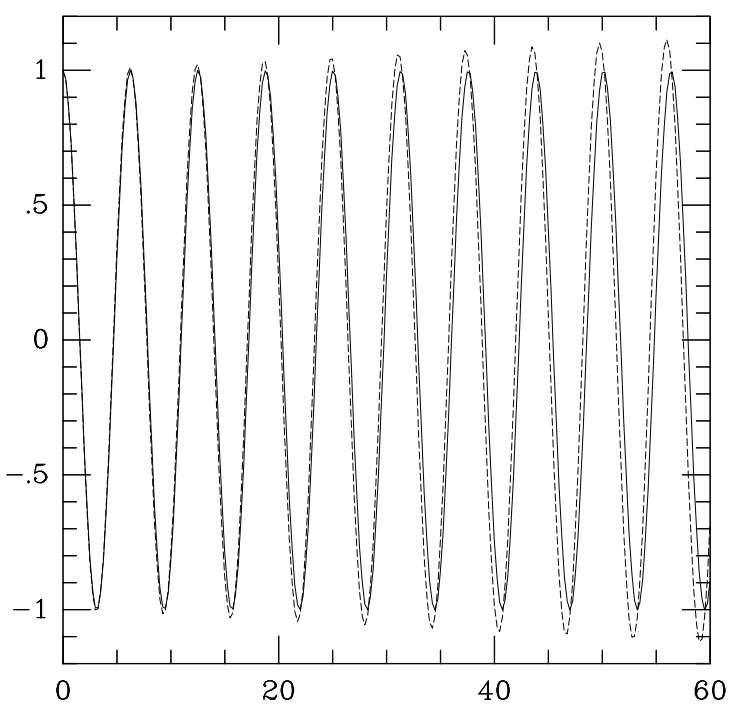
数値例

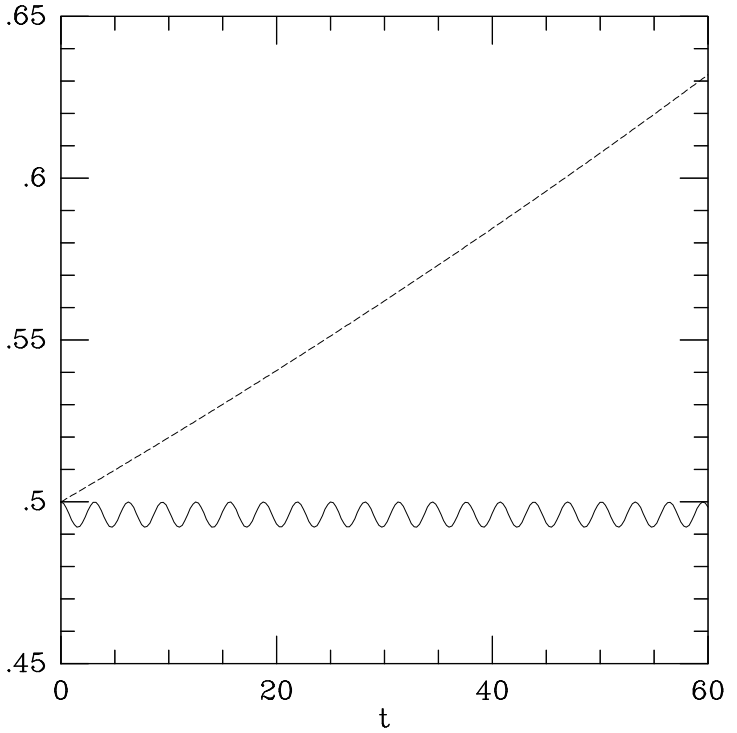
調和振動子

$$\frac{d^2x}{dt^2} = -x \tag{53}$$

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

$$H' = \frac{1}{2}(x^2 + v^2) - \frac{h^2}{4}x^2 \tag{54}$$

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。

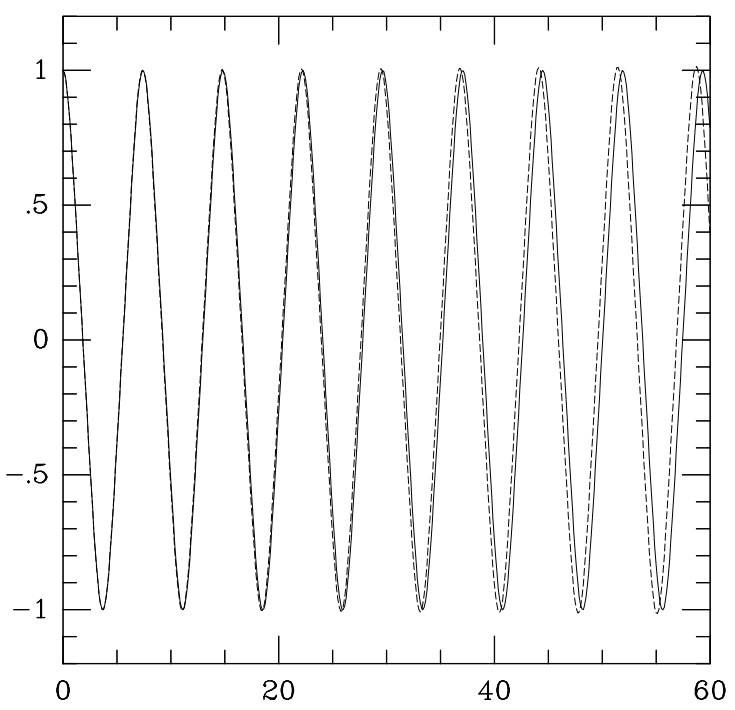
これは、安定でなくなる (差分方程式の固有の絶対値が 1 でなくなる) のと一致している。

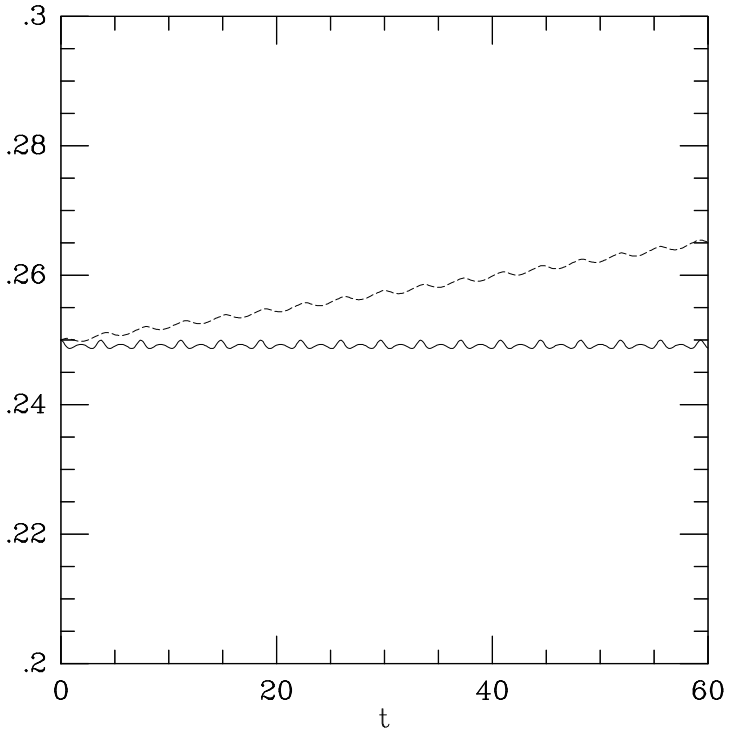
非線形振動

$$\frac{d^2x}{dt^2} = -x^3 \tag{55}$$

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





何故良いか？

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。

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。これはいろんな意味で「最適」な公式なので、それ以外の公式を考える意味はあんまりない。

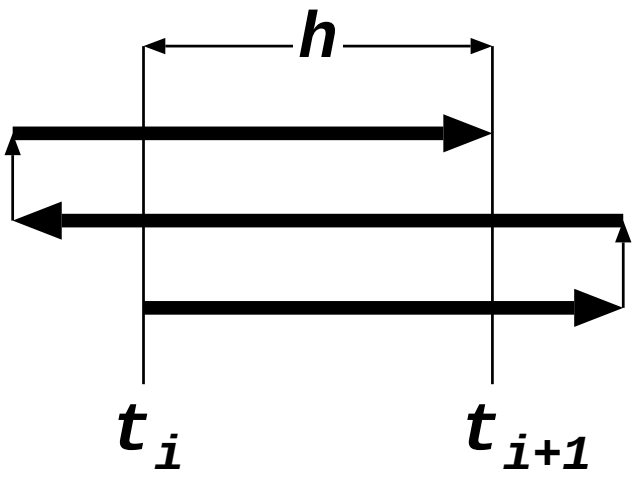
高次の陽的公式

Ruth による 4 次公式

$$
\begin{aligned}
S_4(h) &= L(d_1 h) L(d_2 h) L(d_1 h), \\
d_1 &= 1/(2 - 2^{1/3}), \\
d_2 &= 1 - 2d_1 = -2^{1/3}/(2 - 2^{1/3})
\end{aligned}
\tag{56}
$$

意味: $L(h)$ **がステップ** h **のリープフロッグで 1 ステップだけ積分**

4次公式の意味



戻る量がちょうど進む量の $2^{1/3}$ 倍になっている

行きの2回の誤差 (の主要項) が戻る一回の誤差とキャンセルする。

これを繰り返していくらでも高次の公式を作れる。(段数は多くなる)

6次公式

前ページの 再帰的な方法だと 6 次で9段、8次で 27 段。ちょっと多すぎる。

少ないステージ数で高次の誤差項を一度に消すこともできないことはない。

吉田さんによる6次公式:

$$
\begin{aligned}
d_1 = d_7 &= 0.784513610477560 \\
d_2 = d_6 &= 0.235573213359357 \\
d_3 = d_5 &= -1.17767998417887 \\
d_4 &= 1.31518632068391
\end{aligned}
\tag{57}
$$

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

$$H = H' + h^{p+1} H_p + O(h^{p+2}) \tag{58}$$

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。(吉田さんの研究)

(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

$$H = H_1 + H_2 + \cdots \tag{59}$$

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。

リープフロッグの基本的な考え:

$$H = T(p) + V(q) \tag{60}$$

に対して、pに対する以下の変換

$$p \leftarrow p - \Delta t \frac{\partial H}{\partial q} \tag{61}$$

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:

$$H = T(p) + V_1(q) + V_2(q) \tag{62}$$

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

$$H_1 = T(p) + V_1(q) \tag{63}$$

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

$$p \leftarrow p - \Delta t \frac{\partial V_2}{\partial q} \tag{64}$$

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

$$\frac{dy}{dx} = f(x, y) \tag{65}$$

に対する一段法

$$y_{i+1} = F(x_i, y_i, f, \Delta x) \tag{66}$$

が、

$$y_i = F(x_{i+1}, y_{i+1}, -f, \Delta x) \tag{67}$$

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

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2}(f_i + f_{i+1}) \tag{68}$$

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:

$$\alpha_0 x_{i+p} + \cdots \alpha_p x_i = h^2(\beta_0 f_{i+p} + \cdots \beta_p f_i) \tag{69}$$

$\beta_0 = 0$ 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

$$\alpha_i = \alpha_{p-i}, \quad \beta_i = \beta_{p-i} \tag{70}$$

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、

$$x_{i+1} - 2x_i + x_{i-1} = h^2 f_i \tag{71}$$

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。

$(x_i, \ldots x_{i+p-1})$ 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、$(x_{i+p}, \ldots x_{i+1})$ 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。

エルミート型公式

高次の公式を作るのに、高階の導関数を直接計算してそれを使う。

最も簡単な例: 4 次公式

$$x_1 = x_0 + \frac{\Delta t}{2}(v_1 + v_0) - \frac{\Delta t^2}{12}(a_1 - a_0), \tag{72}$$

$$v_1 = v_0 + \frac{\Delta t}{2}(a_1 + a_0) - \frac{\Delta t^2}{12}(\dot{a}_1 - \dot{a}_0). \tag{73}$$

これは陰的公式。対称化には反復かなにかで方程式を解く必要がある。(収束は割合速い)

時間刻みの対称化

対称型公式でも、普通に時間刻みを変えると上手くいかない。

普通に (適当に) 時間刻みを変える

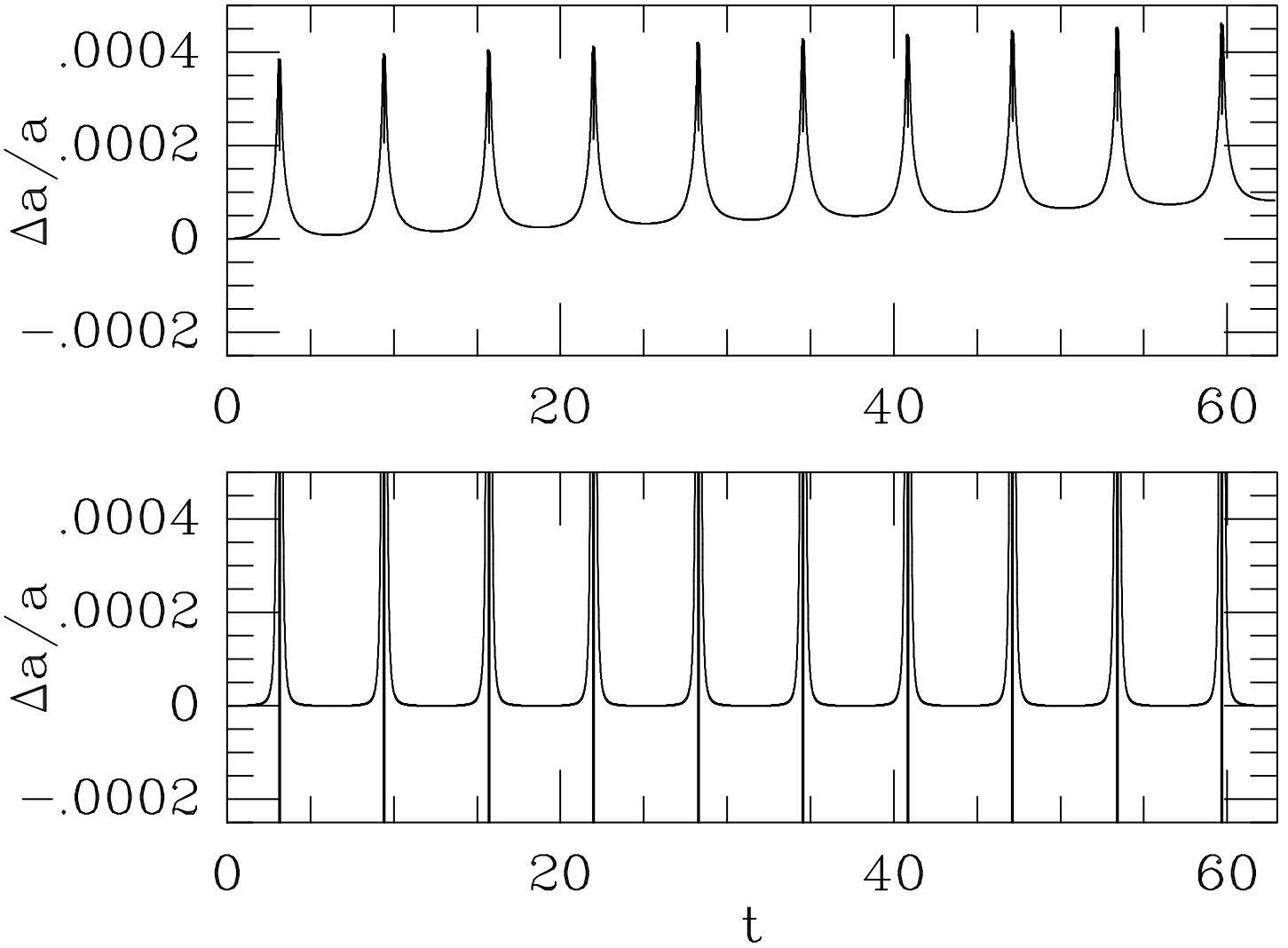
↓

行きと帰りでステップサイズが変わる

↓

元に戻らない

例—ケプラー問題、$e = 0.9$



時間刻み対称化

時間刻みが対称でないというのが永年誤差がでる原因だとすれば、対称にしてしまえば永年誤差がなくなるかも知れない。

時刻 t_0 で計算した時間刻み Δt_0 と 逆に戻る時に t_1 で計算した時間刻み Δt_1 が等しくなるようにする。

一つの可能性は以下のようなもの。

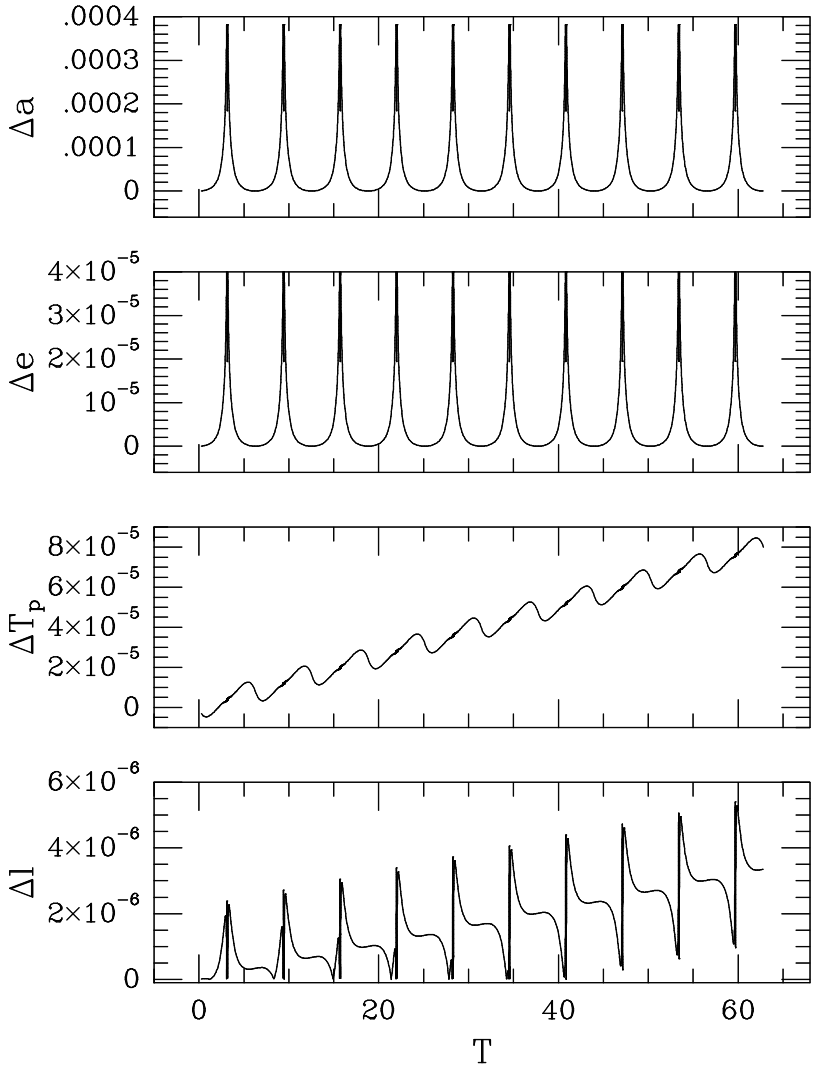
$$\Delta t = \tfrac{1}{2}[h(\xi_0) + h(\xi_1)] \tag{74}$$

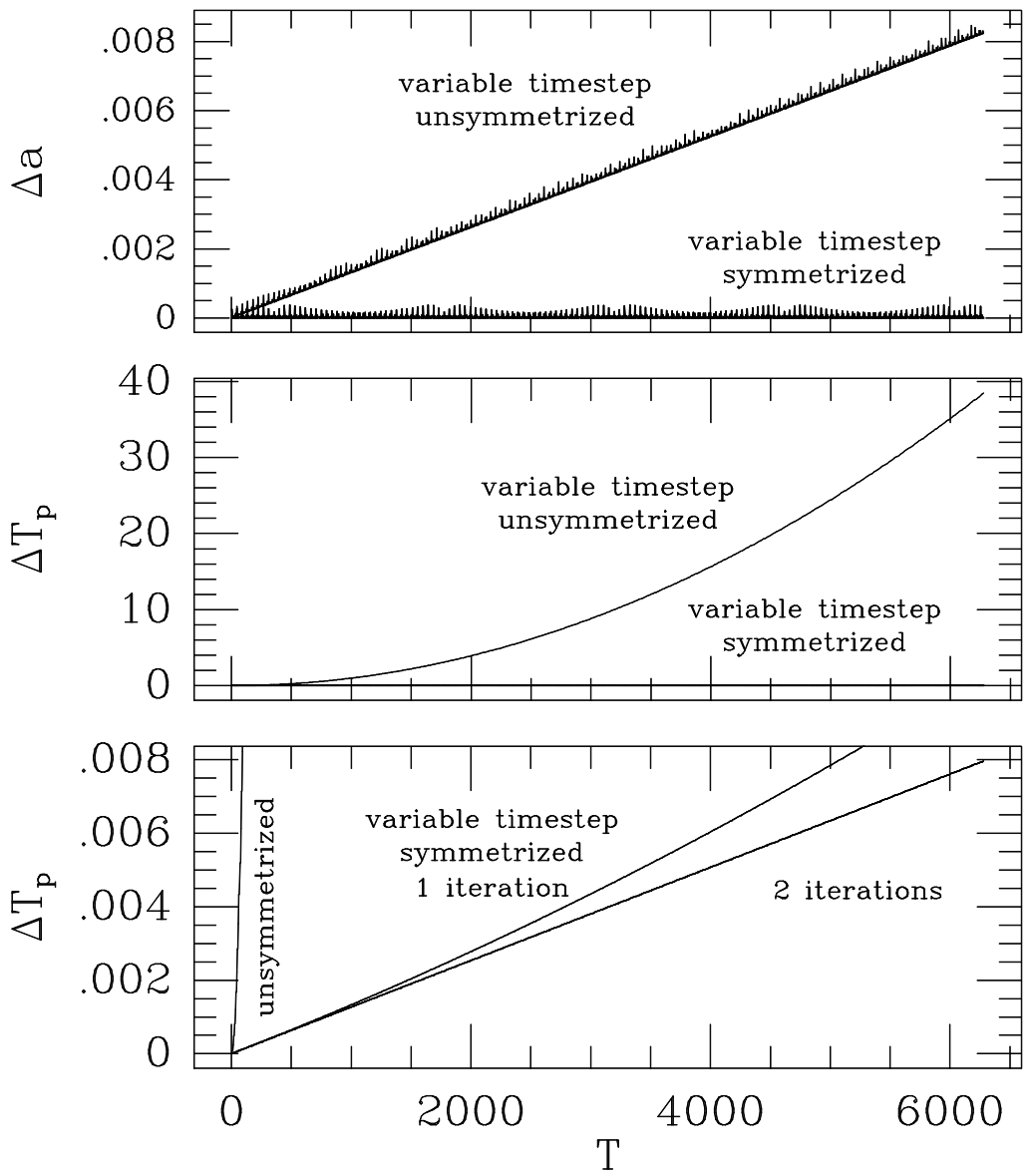
ここで $h(\xi)$ は適当な時間刻みを与える関数

積分の始点と終点で時間刻みをそれぞれ計算して、その平均を取る

ξ_1 は Δt の関数であるので、これは時間刻み自体が陰的に決まるということ。

数値実験


.0004
.0003
.0002
.0001
0
Δa
4×10^-5
3×10^-5
2×10^-5
10^-5
0
Δe
8×10^-5
6×10^-5
4×10^-5
2×10^-5
0
ΔTp
6×10^-6
4×10^-6
2×10^-6
0
Δl
0
20
40
60
T


.008
.006
.004
.002
0
Δa
variable timestep
unsymmetrized
variable timestep
symmetrized
40
30
20
10
0
ΔT_p
variable timestep
unsymmetrized
variable timestep
symmetrized
.008
.006
.004
.002
0
ΔT_p
unsymmetrized
variable timestep
symmetrized
1 iteration
2 iterations
0
2000
4000
6000
T

理論的にわかっていること

Cano と Sanz-Serna は、周期運動するハミルトン系について、

(a) 時間刻み一定のシンプレクテック公式,

(b) 時間ステップ対称化した対称型公式、

(c) ハミルトニアンを保存するように構成された公式

のどれでも、任意の量の誤差が最大でも時間の１次でしか増大しないということを証明した。

これは時間刻み対称化にある程度の理論的裏付けを与える。

まとめ — どういう場合にどういう公式を使うべきか、ということ

一杯方法があるけど、なんだかわからない、と思うかもしれない。

まず、計算時間がたいしてかからないなら、何を使っても答がでるので簡単にプログラムできる、ということが最も優先である。例えば 2 次や 4 次のルンゲ・クッタは良い候補。(オイラー法では丸め誤差が大きくなりすぎるといった問題がでることがある)

まとめ — 続き

計算に何時間、何日もかかる、という時には、プログラムや積分公式を変える意味がでてくる。

非常に長時間(システムの時間の意味で、つまり、沢山の軌道周期にわたって) 積分する、といった場合には、シンプレクティックや対称型のような、長時間積分の誤差が累積しないものが望ましい。

例えば、N 体シミュレーション等では、2次リープフロッグを使うことが多く、もっと高次の方法を使うことはあまりない。これは、高次にするより粒子数を増やすほうが全体としての精度向上には有効だから。

あと、P^3T 公式の話を追加しないといけない。