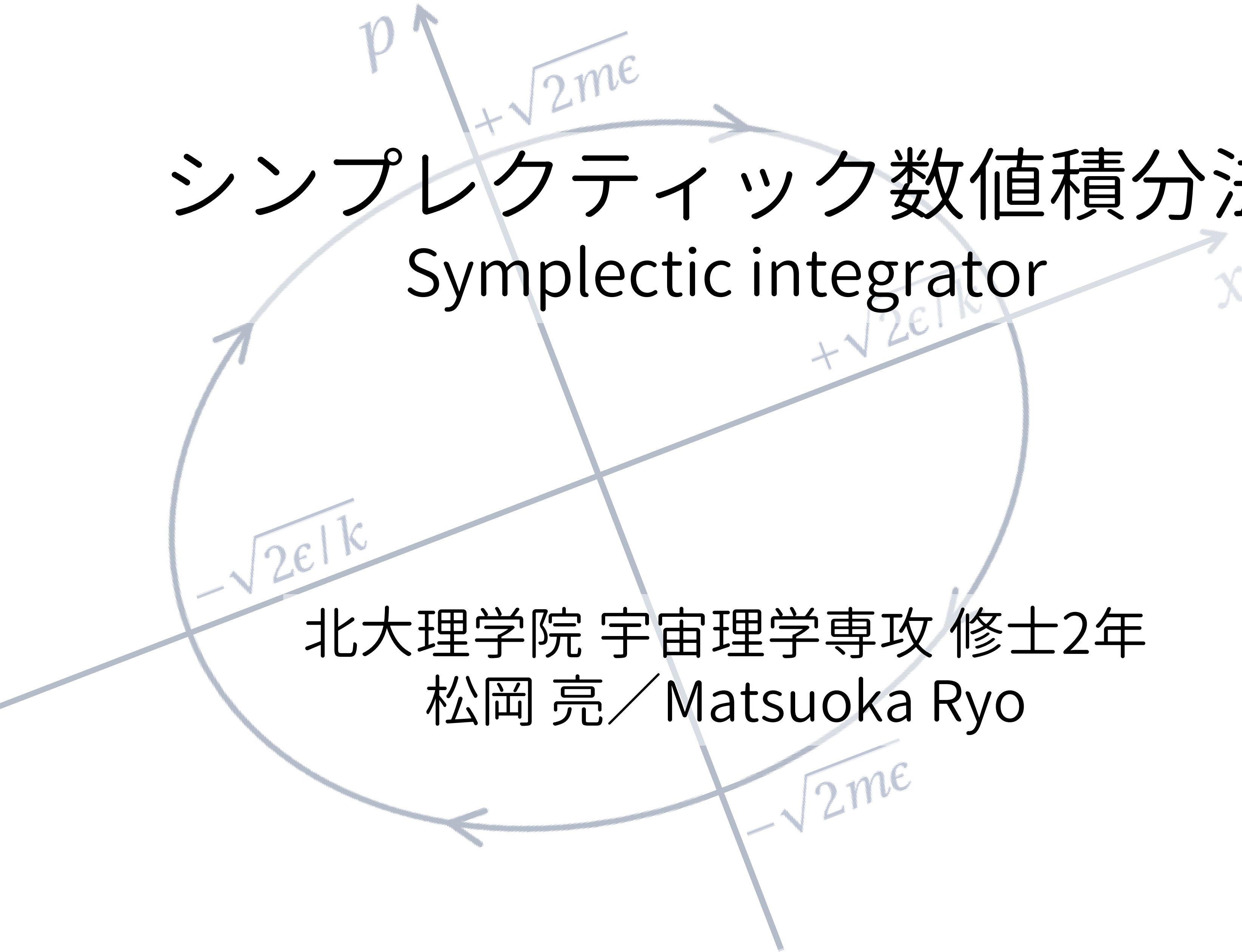
2017/04/21，EPnetFaN座学編

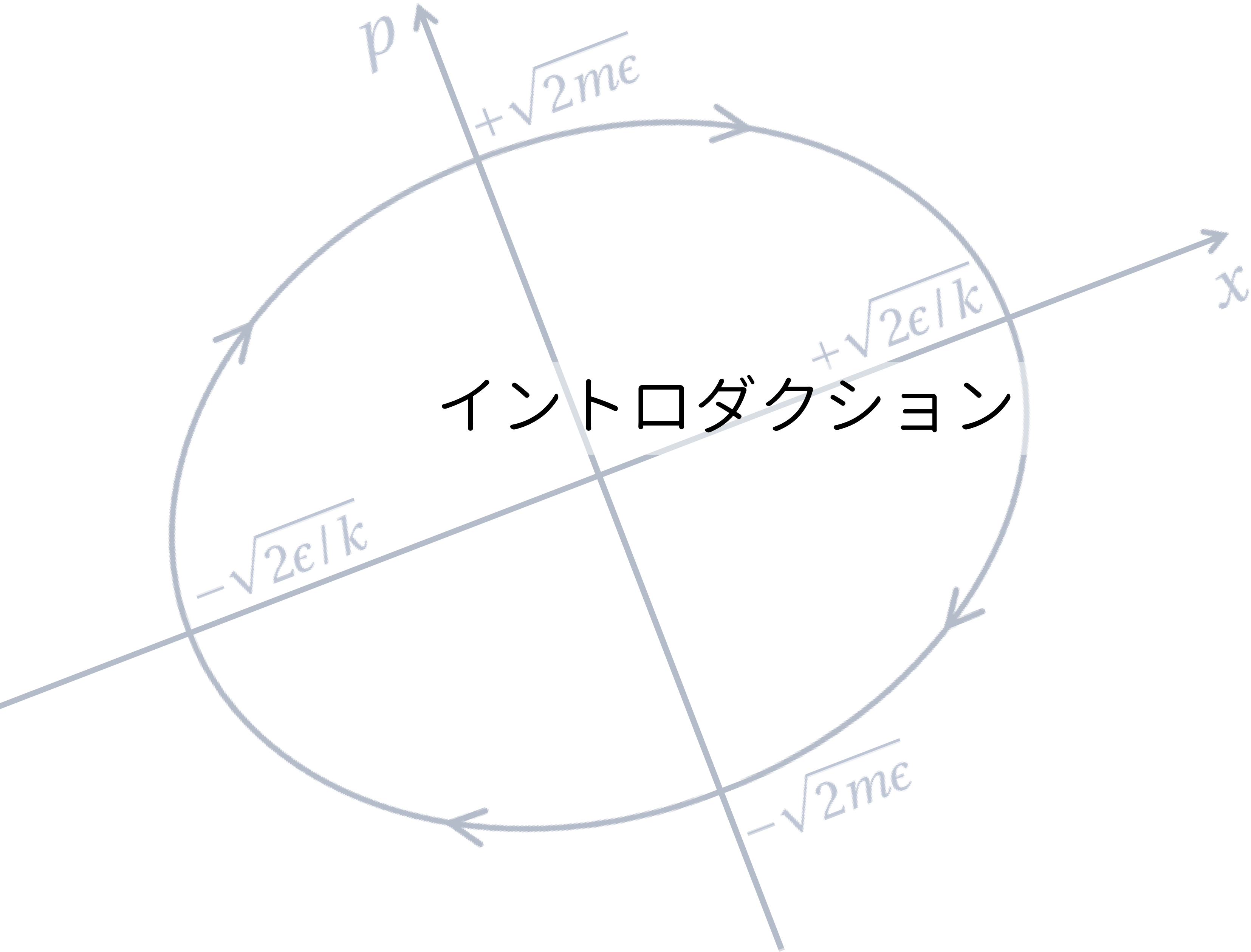
シンプレクティック数値積分法

Symplectic integrator



北大理学院 宇宙理学専攻 修士2年

松岡 亮／Matsuoka Ryo


p
x
$+\sqrt{2m\epsilon}$
$+\sqrt{2\epsilon/k}$
$-\sqrt{2\epsilon/k}$
$-\sqrt{2m\epsilon}$

イントロダクション

シンプレクティック数値積分法のイメージ

- エネルギーが保存する（？）
- 長時間積分に強い（？）
- 天体力学で良く用いられる（？）
- 数学的背景が難しい（？）
- 松岡が好きそう（そうです）

シンプレクティックのココロ

Symplectic = Symmetry + Complex
（Hermann Weylが名付け親）

wikipedia.org

- 数学者にとって… $\hat{J}$（後述）の2-形式に関すること
- 物理学者にとって… 正準変換（後述）に関すること

そもそも数値積分とは？

（常）微分方程式を計算機で解くための手続き．連続な形式を離散な形式に置き換える（**離散化**）．

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

一番簡単な例：Euler法

微分の定義式を思い出して離散化をする．

$$\frac{x^{i+1} - x^i}{\epsilon} = f(x^i, i\epsilon)$$

$$\Longleftrightarrow x^{i+1} = x^i + \epsilon f(x^i, i\epsilon).$$

離散化手続きの違い ⇔ 数値積分法の違い ⇔ 計算特性の違い

Hamilton系とシンプレクティック数値積分法

Hamilton系

$q(t), p(t)$ に関する常微分方程式系

$$\frac{dq}{dt} = f(q,p),\ \ \frac{dp}{dt} = g(q,p)$$

で，

$$f(q,p) = \frac{\partial H}{\partial p},\ \ g(q,p) = -\frac{\partial H}{\partial q}$$

なる滑らかな関数$H(q,p)$ が存在するとき，この方程式系を **Hamilton系**と呼び，Hを**Hamiltonian**と呼ぶ．

$$\begin{cases} \dfrac{dq}{dt} = \dfrac{\partial H}{\partial p}, \\ \dfrac{dp}{dt} = -\dfrac{\partial H}{\partial q} \end{cases}$$

は**Hamilton方程式**と呼ばれる．

保存系としてのHamilton系

q, pで貼られた空間（**相空間**）を考えると，Hamiltonianは相空間上の関数となる．

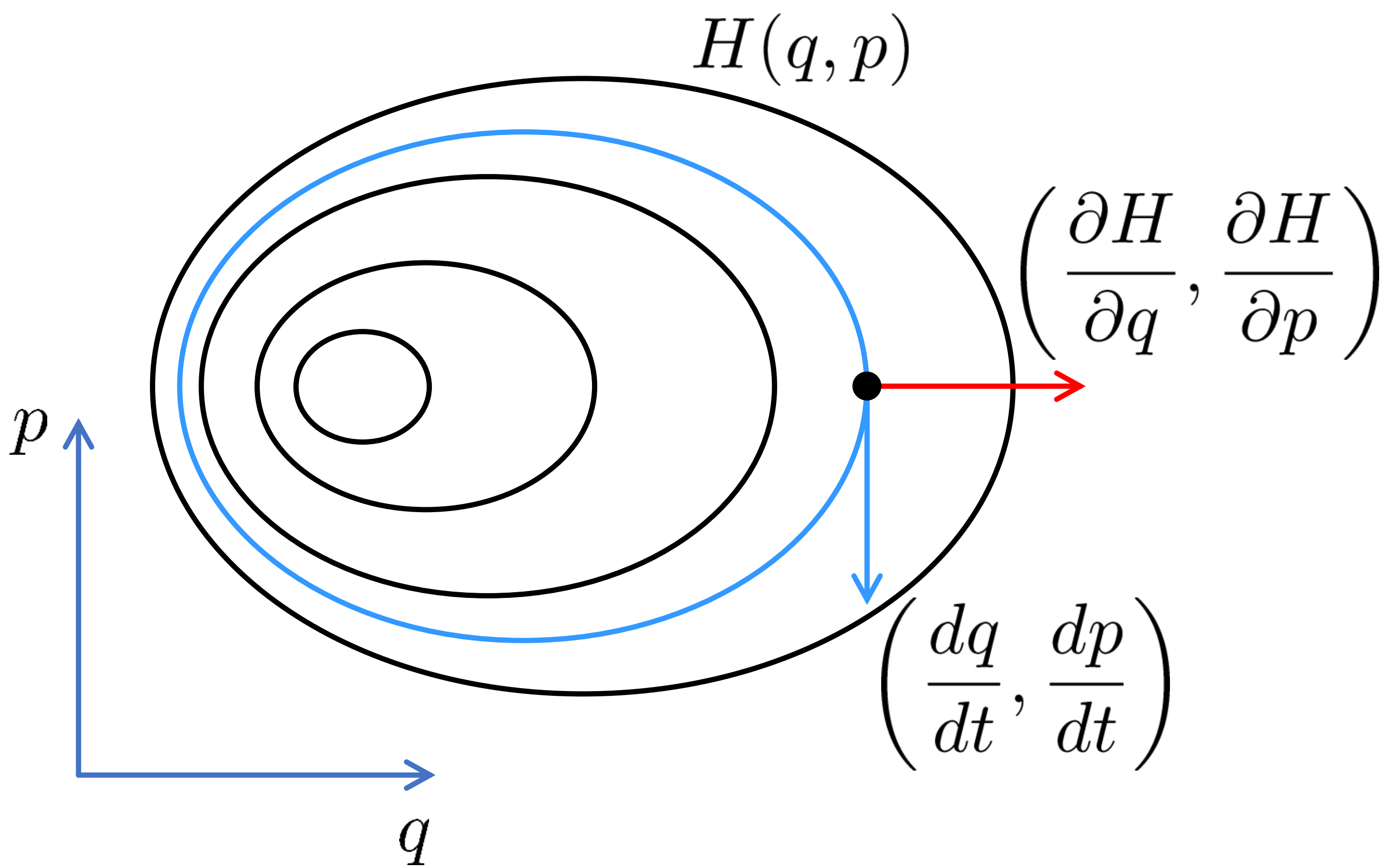
定理
Hamilton方程式が描く相空間上の軌道はHの等値線となる．
すなわち，<u>Hamiltonian Hは時間不変</u>．

相空間上の速度とHの相空間上の勾配ベクトルの内積を取れば示せる．

$$\left(\frac{dq}{dt}, \frac{dp}{dt}\right) \cdot \left(\frac{\partial H}{\partial q}, \frac{\partial H}{\partial p}\right) = \left(\frac{\partial H}{\partial p}, -\frac{\partial H}{\partial q}\right) \cdot \left(\frac{\partial H}{\partial q}, \frac{\partial H}{\partial p}\right)$$

$$= 0.$$

保存系としてのHamilton系



質点の古典力学のHamilton形式

q を（一般化）座標，p を（一般化）運動量とし，

$$H(q,p) = \frac{p^2}{2m} + U(q) = E$$

とおけば，Hamilton系はポテンシャル U の下での質量 m の質点の力学を与え，Hamilton方程式はNewtonの運動方程式と同値になる．

$$\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{p}{m}, \quad \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q} = -\frac{\partial U}{\partial q}.$$

時間不変なHamiltonianは，エネルギー保存則を与える．

Hamilton方程式の行列形式

$$
\begin{cases}
\dfrac{dq}{dt} = \dfrac{\partial H}{\partial p}, \\[2ex]
\dfrac{dp}{dt} = -\dfrac{\partial H}{\partial q}.
\end{cases}
$$

$$
(z_1, z_2) = (q, p),
$$

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

$$
\frac{dz_i}{dt} = J_{ij} \frac{\partial H}{\partial z_j}.
$$

正準変換

変数変換 $(z_1, z_2) \mapsto (\zeta_1, \zeta_2) = \big(\zeta_1(z_1, z_2), \zeta_2(z_1, z_2)\big)$ で，変換後の変数もHamilton方程式

$$\frac{d\zeta_1}{dt} = \frac{\partial H}{\partial \zeta_2}, \qquad \frac{d\zeta_2}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial \zeta_1}$$

を満たすものを**正準変換**という．

例：$(q, p) \mapsto (Q, P) = (p, -q)$

$$\frac{dQ}{dt} = \frac{dp}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q} = \frac{\partial H}{\partial P},$$

$$\frac{dP}{dt} = -\frac{dq}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial p} = -\frac{\partial H}{\partial Q}.$$

シンプレクティック関係式

$$
\begin{aligned}
\frac{d\zeta_a}{dt} &= \frac{\partial \zeta_a}{\partial z_i}\frac{dz_i}{dt} \\
&= \frac{\partial \zeta_a}{\partial z_i} J_{ij} \frac{\partial H}{\partial z_j} \\
&= \underbrace{\frac{\partial \zeta_a}{\partial z_i} J_{ij} \frac{\partial \zeta_b}{\partial z_j}}_{J_{ab}\text{となればHamilton方程式}} \frac{\partial H}{\partial \zeta_b}.
\end{aligned}
$$

変数変換 $z \to \zeta$ でHamilton方程式を満たす条件を調べる.

シンプレクティック関係式

$$\frac{\partial \zeta_a}{\partial z_i} J_{ij} \frac{\partial \zeta_b}{\partial z_j} = J_{ab}.$$

$$\hat{M} = \left[\frac{\partial \zeta_a}{\partial z_i}\right]_{ai} = \begin{pmatrix} \frac{\partial \zeta_1}{\partial z_1} & \frac{\partial \zeta_1}{\partial z_2} \\ \frac{\partial \zeta_2}{\partial z_1} & \frac{\partial \zeta_2}{\partial z_2} \end{pmatrix}.$$

$$\hat{M}\hat{J}\hat{M}^T = \hat{J}.$$

これをシンプレクティック関係式という．
また，$\hat{M}$ をシンプレクティック行列という．

$z \to \zeta$ が正準変換 ⇔ 変換のJacobianがシンプレクティック．

Poisson括弧式

$$\{f, g\} = \frac{\partial f}{\partial q}\frac{\partial g}{\partial p} - \frac{\partial f}{\partial p}\frac{\partial g}{\partial q}$$
$$= \frac{\partial f}{\partial z_i} J_{ij} \frac{\partial g}{\partial z_j}.$$

この二項演算をPoisson括弧式という．

Poisson括弧式の性質

$$\{f,g\} = \frac{\partial f}{\partial q}\frac{\partial g}{\partial p} - \frac{\partial f}{\partial p}\frac{\partial g}{\partial q}.$$

反対称性 $\{B,A\} = -\{A,B\}.$

Leibnitz則 $\{A,B\}' = \{A',B\} + \{A,B'\}.$

$\{AB,C\} = A\{B,C\} + B\{A,C\}.$

線型性 $\{\alpha A + \beta B, C\} = \alpha\{A,C\} + \beta\{B,C\}.$

Jacobi恒等式 $\{A,\{B,C\}\} + \{C,\{A,B\}\} + \{B,\{C,A\}\} = 0.$

正準交換関係 $\{q_i, p_j\} = \delta_{ij}.$

Poisson括弧式のシンプレクティック不変性

Poisson括弧式は正準変換の前後で不変（正準不変量）．

$$
\begin{aligned}
\{f, g\}_z &= \frac{\partial f}{\partial z_i} J_{ij} \frac{\partial g}{\partial z_j} \\
&= \frac{\partial f}{\partial \zeta_a} \frac{\partial \zeta_a}{\partial z_i} J_{ij} \frac{\partial \zeta_b}{\partial z_j} \frac{\partial g}{\partial \zeta_b} \\
&= \frac{\partial f}{\partial \zeta_a} J_{ab} \frac{\partial g}{\partial \zeta_b} \\
&= \{f, g\}_\zeta .
\end{aligned}
$$

時間発展は正準変換

連続パラメータ$\epsilon > 0$による微小時間発展$(q,p) \mapsto (Q,P) = (q+\epsilon\dot{q}, p+\epsilon\dot{p})$ を考え，正準変数のPoisson括弧式を計算する．

$$
\begin{aligned}
\{Q,P\} &= \{q+\epsilon\dot{q}, p+\epsilon\dot{p}\} \\
&= \{q,p\} + \{q,\epsilon\dot{p}\} + \{\epsilon\dot{q},p\} + \{\epsilon\dot{q},\epsilon\dot{p}\} \\
&= \{q,p\} + \epsilon\frac{d}{dt}\{q,p\} + O(\epsilon^2) \\
&= \{q,p\} \quad \text{as } \epsilon \to 0.
\end{aligned}
$$

微小時間発展は正準変換 ⇔ <u>時間発展は正準変換</u>
（∵ 正準変換の合成は正準変換になる）

Hamilton力学系の数値積分はシンプレクティックであるべき

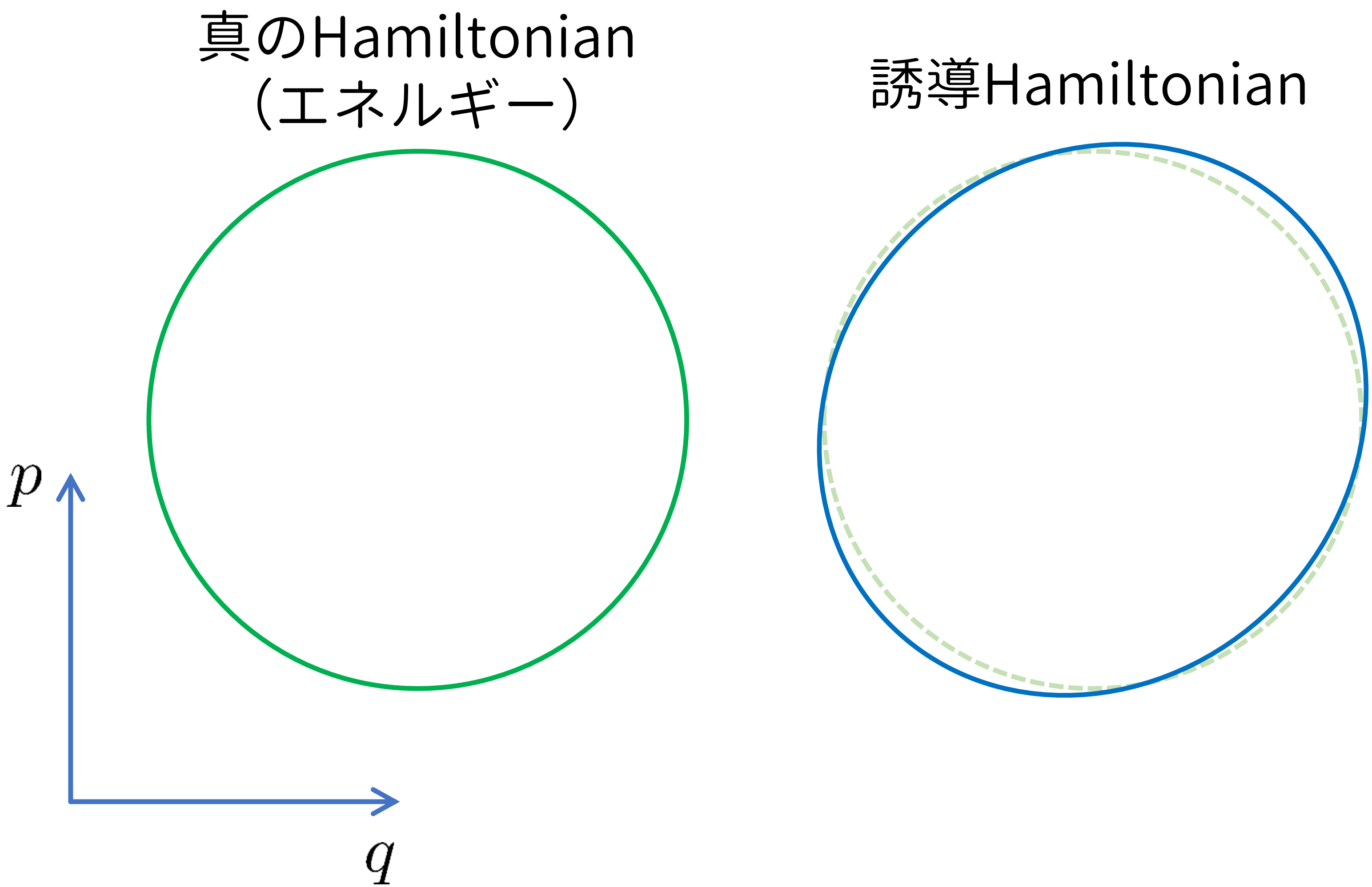
シンプレクティック数値積分のエネルギー

シンプレクティック数値積分から誘導されるHamiltonian $\widetilde{H}$と
エネルギー$E = H_{\mathrm{true}}$は不一致
↓
エネルギーは（厳密には）保存しない

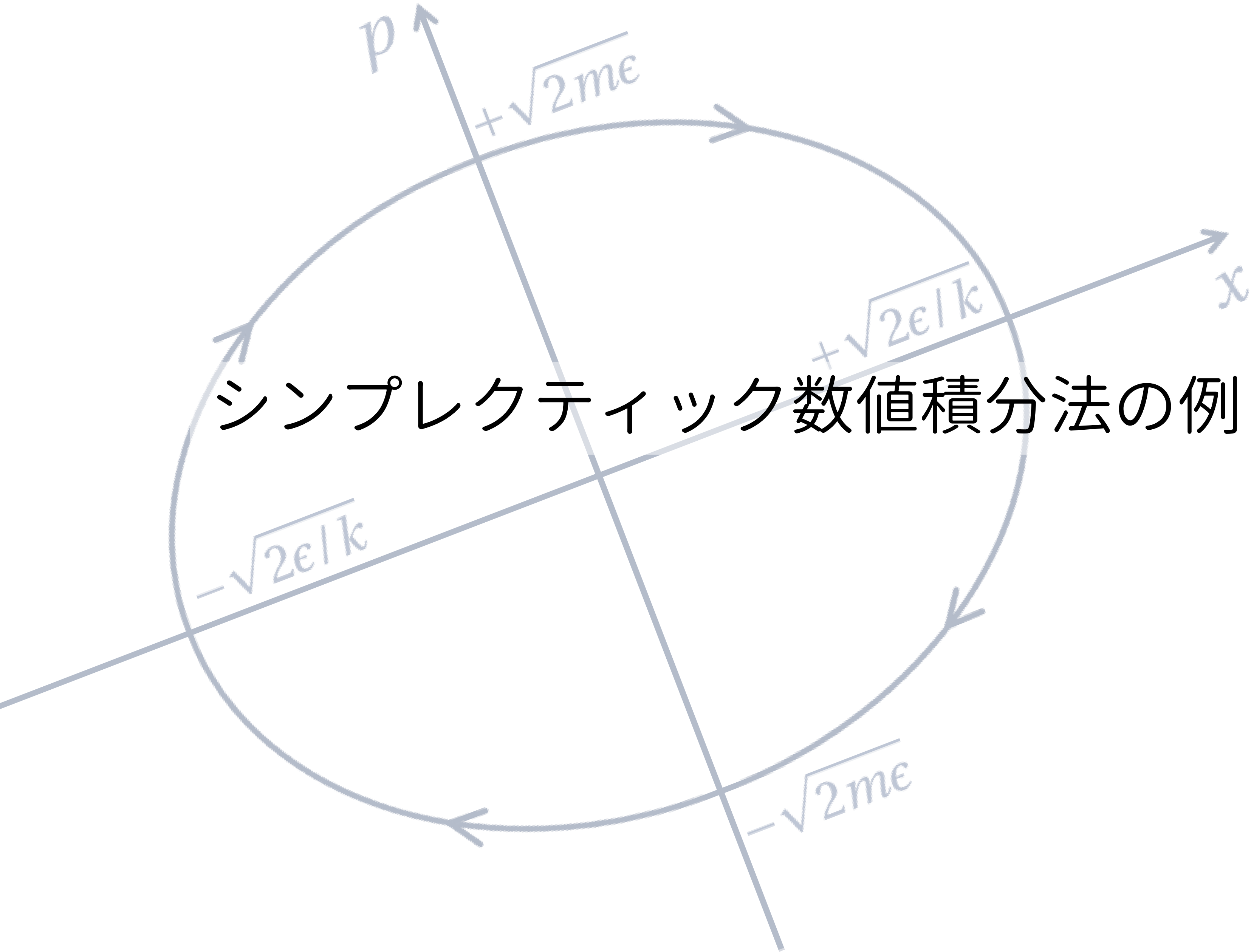
ただし，真のHamiltonianと誘導Hamiltonianはよく似て
いるので，相空間上の軌道をよく再現する
↓
エネルギーの誤差 $\widetilde{H} - H_{\mathrm{true}}$ は発散しない

？？？

シンプレクティック数値積分のエネルギー



シンプレクティック数値積分法の例



Euler法はシンプレクティックか？

$m=1,\ k=1$の調和振動子$H=\frac{1}{2}(q^2+p^2)$を考える．

Euler法

$$\dot{y}=f(y,t) \iff y^{n+1}=y^n+\epsilon f(y^n,t).$$

$$\begin{cases} \dot{q}=\dfrac{\partial H}{\partial q}=p, \\ \dot{p}=-\dfrac{\partial H}{\partial p}=-q \end{cases} \iff \begin{cases} q^{n+1}=q^n+\epsilon p^n, \\ p^{n+1}=p^n-\epsilon q^n. \end{cases}$$

Euler法はシンプレクティックか？

$$
\begin{cases}
q^{n+1} = q^n + \epsilon p^n, \\
p^{n+1} = p^n - \epsilon q^n.
\end{cases}
$$

Poisson括弧式を計算．

$$
\begin{aligned}
&\{q^{n+1}, p^{n+1}\} \\
&= \{q^n + \epsilon p^n, p^n - \epsilon q^n\} \\
&= \{q^n, p^n\} + \cancel{\{\epsilon p^n, p^n\}} + \cancel{\{q^n, -\epsilon q^n\}} + \{\epsilon p^n, -\epsilon q^n\} \\
&= \{q^n, p^n\} + \epsilon^2.
\end{aligned}
$$

有限のϵに対して，
Euler法はシンプレクティック数値積分法ではない

Euler法のエネルギー

$$
\begin{cases}
q^{n+1} = q^n + \epsilon p^n, \\
p^{n+1} = p^n - \epsilon q^n.
\end{cases}
$$

$$
\begin{aligned}
&(q^{n+1})^2 + (p^{n+1})^2 \\
=&(q^n + \epsilon p^n)^2 + (p^n - \epsilon q^n)^2 \\
=&(q^n)^2 + \cancel{2\epsilon q^n p^n} + \epsilon^2 (p^n)^2 + (p^n)^2 \cancel{- 2\epsilon q^n p^n} + \epsilon^2 (q^n)^2 \\
=&(1+\epsilon^2)\left\{(q^n)^2 + (p^n)^2\right\}.
\end{aligned}
$$

Euler法のエネルギーは単調増加
（しかも指数関数的に誤差増大…）

シンプレクティックEuler法

シンプレクティックEuler法

$$\begin{cases} q^{n+1} = q^n + \epsilon \dfrac{\partial H}{\partial p}(q^n, p^n), \\ p^{n+1} = p^n - \epsilon \dfrac{\partial H}{\partial q}(q^{n+1}, p^n). \end{cases}$$

$H = \frac{1}{2}(q^2 + p^2)$なる調和振動子では，

$$\begin{cases} q^{n+1} = q^n + \epsilon p^n, \\ p^{n+1} = p^n - \epsilon q^{n+1}. \end{cases}$$

シンプレクティックEuler法

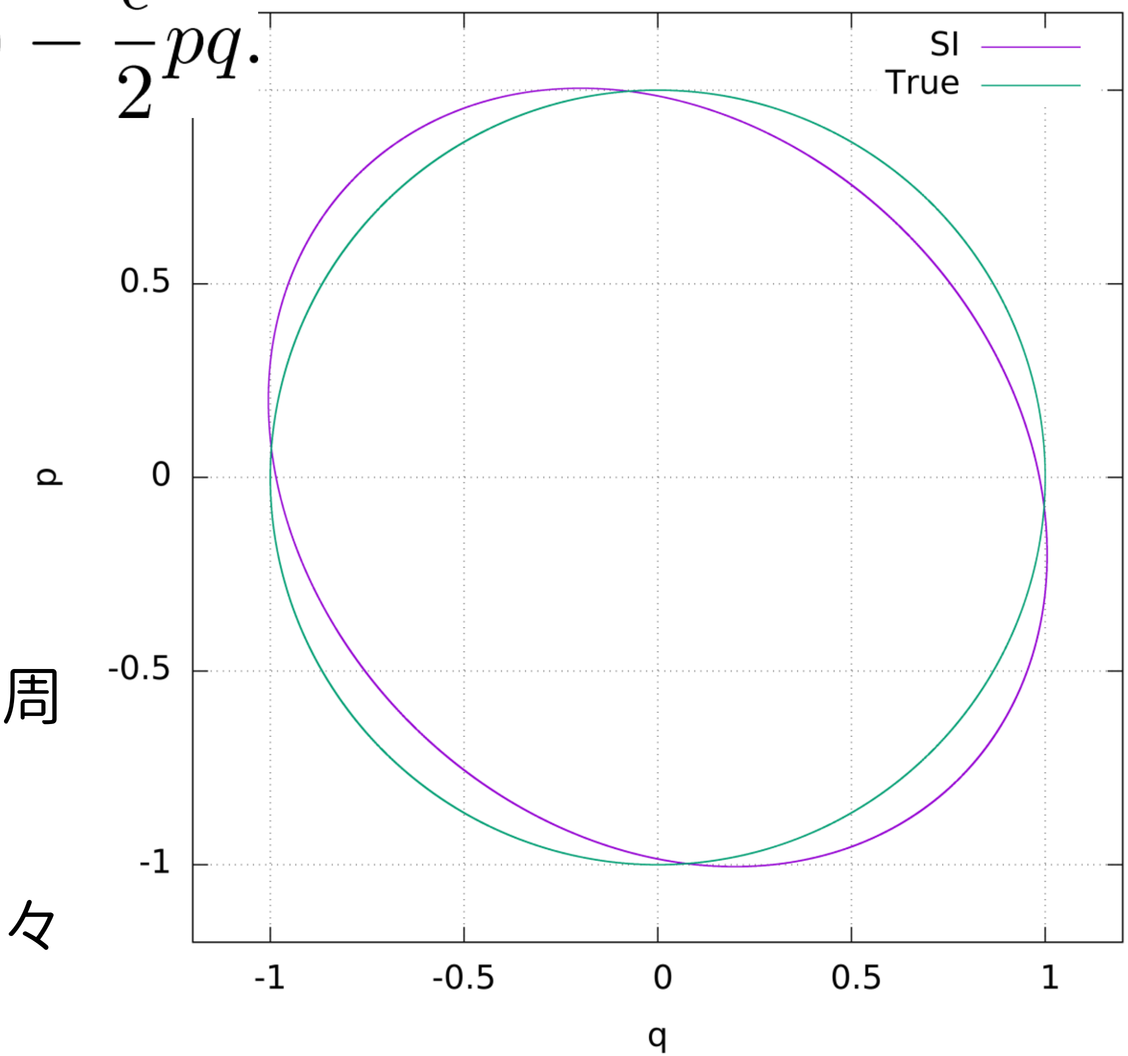
$$
\begin{cases}
q^{n+1} = q^n + \epsilon p^n, \\
p^{n+1} = p^n - \epsilon q^{n+1}.
\end{cases}
$$

$$
\begin{aligned}
&\{q^{n+1}, p^{n+1}\} \\
&= \{q^n + \epsilon p^n, p^n - \epsilon q^{n+1}\} \\
&= \{q^n, p^n\} + \cancel{\{\epsilon p^n, p^n\}} + \{q^n, -\epsilon q^{n+1}\} + \{\epsilon p^n, -\epsilon q^{n+1}\} \\
&= \{q^n, p^n\} - \epsilon\{q^n, q^n + \epsilon p^n\} - \epsilon^2\{p^n, q^n + \epsilon p^n\} \\
&= \{q^n, p^n\} \cancel{- \epsilon^2\{q^n, p^n\} - \epsilon^2\{p^n, q^n\}} \\
&= \{q^n, p^n\}.
\end{aligned}
$$

シンプレクティックEuler法はシンプレクティック数値積分法

シンプレクティックEuler法のエネルギー

$$\tilde{H} = \frac{1}{2}(q^2 + p^2) - \frac{\epsilon}{2}pq.$$



- 真の軌道に近い軌道
- 真のエネルギー値の周りを振動
- エネルギー誤差は高々 ϵ のオーダー

リープ・フロッグ法

$$p^{n+\frac{1}{2}} = p^n - \frac{\epsilon}{2}\frac{\partial H}{\partial q}(q^n, p^{n+\frac{1}{2}}),$$

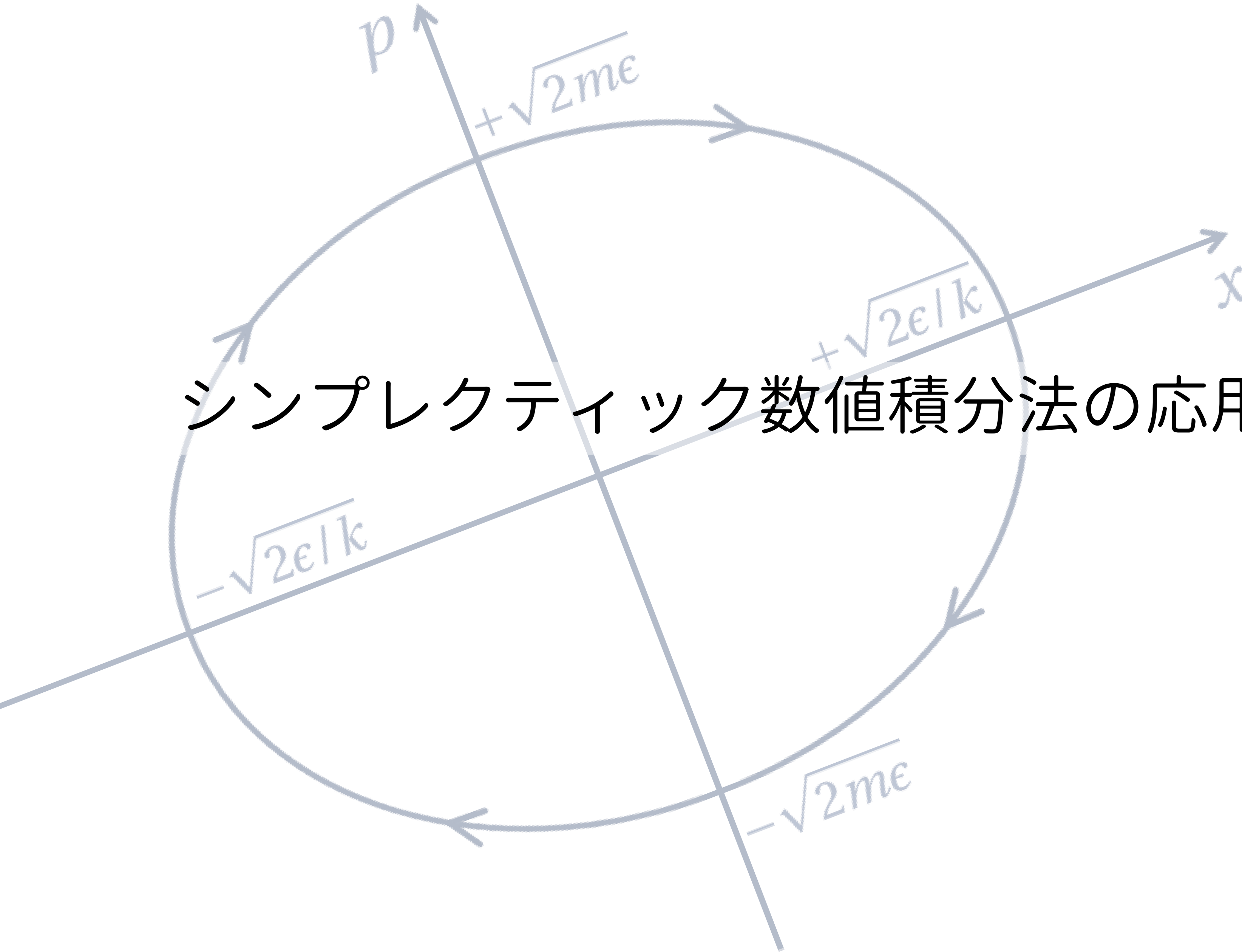
$$q^{n+1} = q^n + \frac{\epsilon}{2}\left\{\frac{\partial H}{\partial p}(q^n, p^{n+\frac{1}{2}}) + \frac{\partial H}{\partial p}(q^{n+1}, p^{n+\frac{1}{2}})\right\},$$

$$p^{n+1} = p^n - \frac{\epsilon}{2}\left\{\frac{\partial H}{\partial q}(q^n, p^{n+\frac{1}{2}}) + \frac{\partial H}{\partial q}(q^{n+1}, p^{n+\frac{1}{2}})\right\}.$$

$$\tilde{H} = \frac{1}{2}(q^2 + p^2) - \frac{\epsilon^2}{8}pq.$$

- 半時ステップを採用
- エネルギー誤差は高々 $O(\epsilon^2)$

シンプレクティック数値積分法の応用



シンプレクティック数値積分法の有効性

シンプレクティック数値積分法は
Hamilton系に対してよい振る舞い

↓

Hamilton系はどこにあるか？

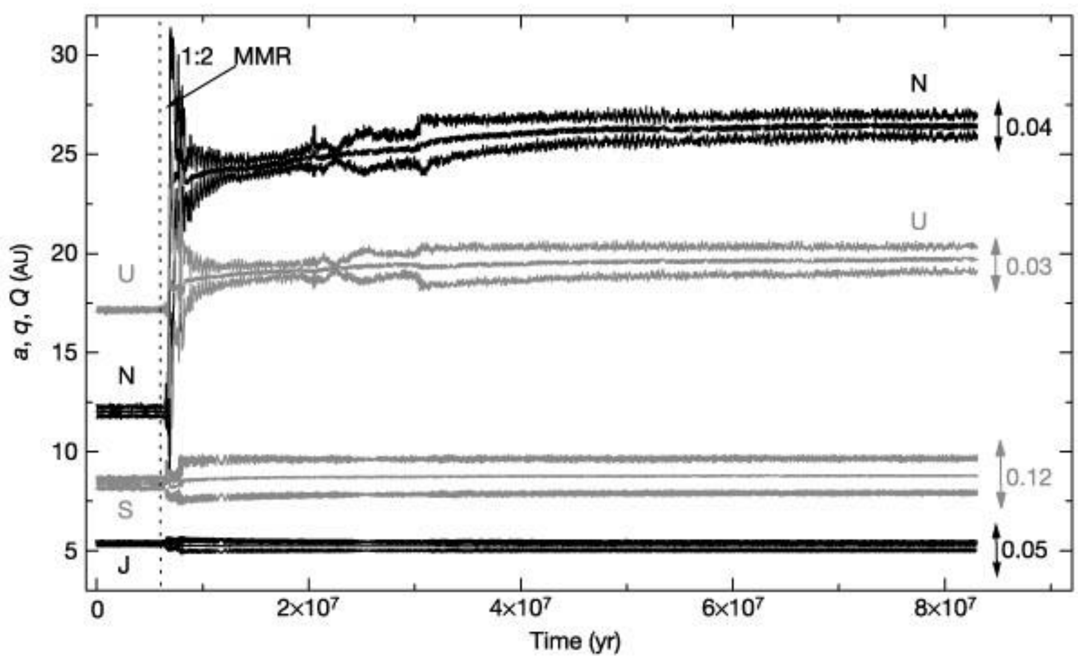
↓

「保存量」が存在するところ

質点系の力学のシミュレーション

天体力学はエネルギーが保存する場合が多い

MERCURY(N体重力シミュレーションコード)
…HB15というシンプレクティックスキームを用いている

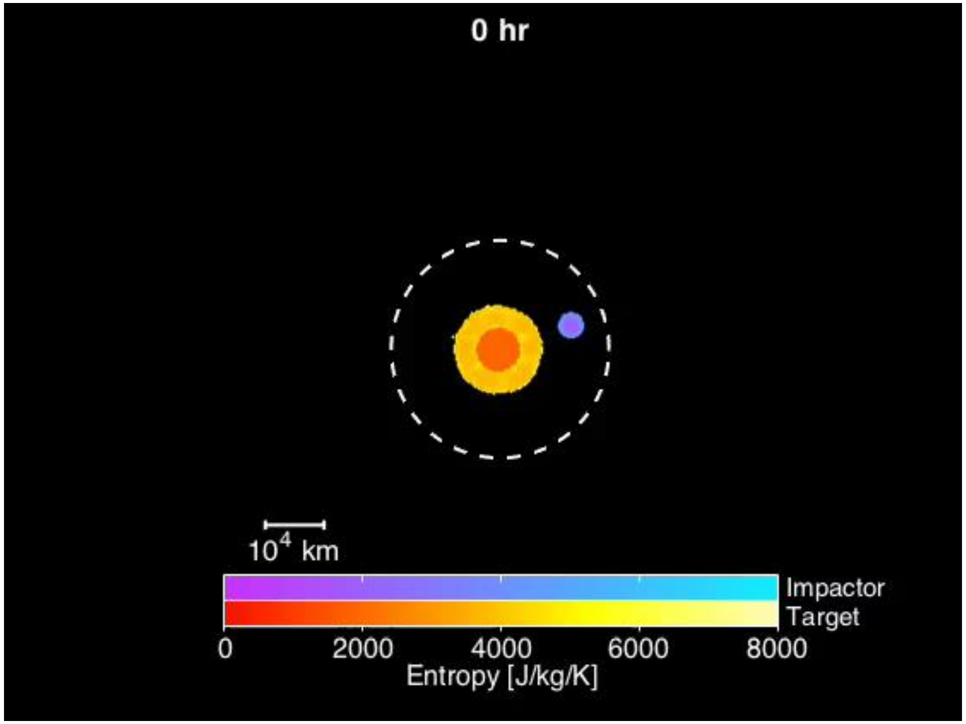


数億年にわたる太陽系初期の惑星大移動のシミュレーション
(Tsiganis et al. 2005)

質点系の力学のシミュレーション

天体力学はエネルギーが保存する場合が多い

GADGET-2 (N体SPHシミュレーションコード)
…保存系が寄与する部分はリープ・フロッグ法を用いている



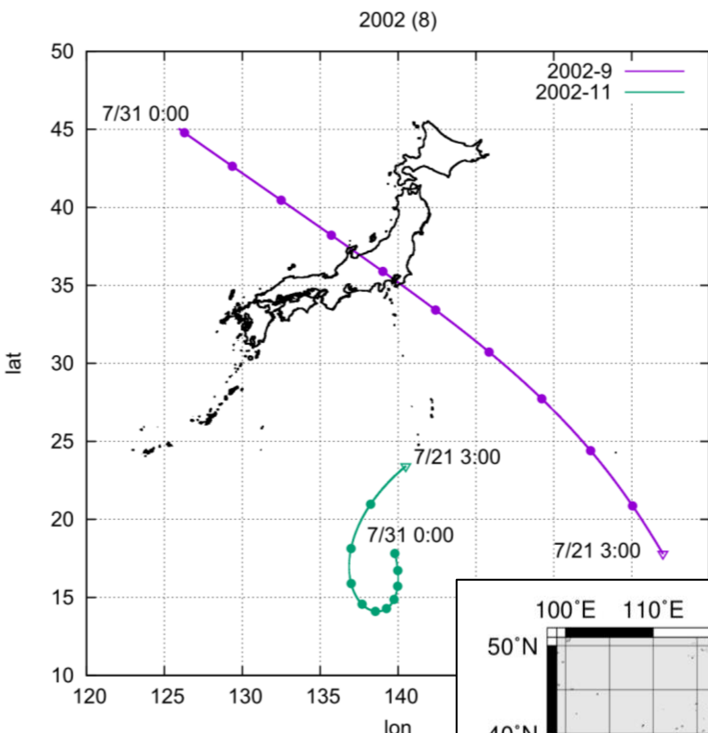
地球への原始惑星の衝突シミュレーション.
(Rufu et al. 2017)

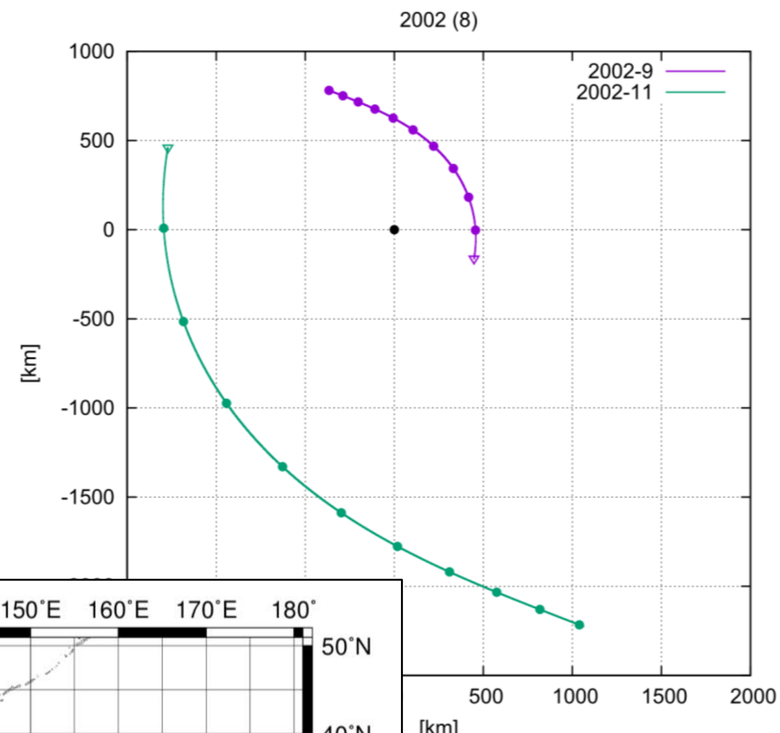
流体のシミュレーション

非圧縮性流体：空間座標を正準変数，流れ関数をHamiltonianとするHamilton系とみなせる（**流体力学の正準形式**）．

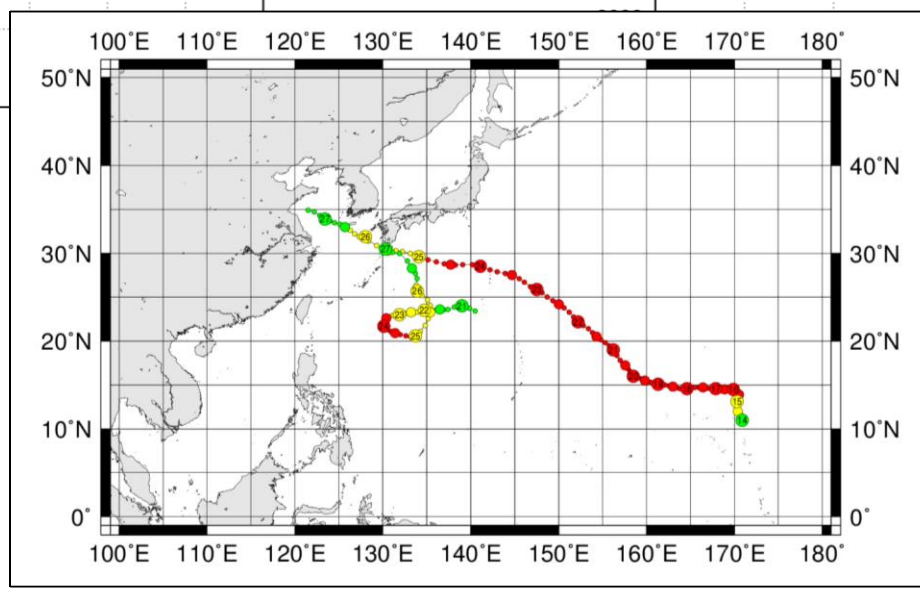
$$u = \frac{\partial \psi}{\partial y}, \quad v = -\frac{\partial \psi}{\partial x}.$$

流体のシミュレーション





2002年台風9号と台風11号の藤原効果の簡単な2体シミュレーション．
左：絶対座標，右：重心座標．
鈴木（北大環科院）と松岡で作成．



デジタル台風

参考文献

1. **柴山 允瑠**, 「重点解説 ハミルトン力学系 〜可積分系とKAM理論を中心に〜」, 臨時別冊・数理科学, サイエンス社, 2016.
2. **十河 清**, 「解析力学と交換子」, 数理科学, No. 576, 2011.
3. **吉田 春男**, 「ハミルトニアン力学系のためのシンプレクティック数値積分法」, 共同研究「非線形現象の数理科学」湘南レクチャー論文集, p. 68-83, 1997.
4. **Hernandez, D. M.**, "Fast and reliable symplectic integration for planetary system N-body problems", *MNRAS*, 2016.
5. **Lubich, C.**, "Symplectic integration of Hamiltonian systems", https://na.uni-tuebingen.de/lubich/chap6.pdf
6. **Springel, V.**, "The cosmological simulation code GADGET-2", *MNRAS*, 2005.