



### 3. 離散シンプレクティック積分法の理論

#### 3. Discrete Symplectic Integrators

徳田 伸二

TOKUDA Shinji

高度情報科学技術研究機構

(原稿受付：2014年8月11日)

位相空間における離散変分原理により運動を離散的に決定する方法を解説する。位相空間における作用積分を厳密に停留にする連続的な経路—それはもちろん Hamilton の運動方程式を満たす—に対する作用積分は経路の端点だけの関数であり、その関数（生成関数と呼ばれる）は、端点間の関係を離散的な初期値問題の解として与える離散 Hamiltonian の役割を果たす。そして、離散 Hamiltonian から生成される離散経路は、連続的な経路の、対応する時刻における値に一致する（すなわち標本点となる）。それゆえ、Galerkin 法により作用積分を近似的に停留にすれば、それから作られる離散 Hamiltonian は厳密な離散経路を近似する運動を与える。さらに、このようにして作られる積分スキームはシンプレクティックである。離散変分原理と Galerkin 法は変分法的な積分スキームを作る系統的な方法となる。その一例として Symplectic Partitioned Runge-Kutta (SPRK) 法とその簡単な応用例を示す。

#### Keywords:

discrete Hamilton dynamics, Galerkin approximation, symplectic integrator, symplectic partitioned Runge-Kutta method

#### 3.1 序論

古典力学のコースを一通り学んだ学生にとって古典力学の問題を解くレシピとは、Hamiltonian  $H(q, p)$  の関数形を求めて、Hamilton の運動方程式

$$\frac{dq}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p}, \quad \frac{dp}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q} \quad (1)$$

を立て、MATLAB（これは有料）あるいはOCTAVE（これは無料）に式を放り込んで数値解を得ることであるかもしれない。それ以上のことは、数学好きのための学術的な話か、量子力学を学ぶ際に Hamiltonian  $H(q, p)$  が出てきても驚かないための「準備」でしかすぎない。しかしながら、このレシピでは「良い」解答を得るのは難しいと、少なくとも現代（21世紀のこと）ではみなされているようである。

運動方程式(1)は位相空間  $(q, p)$  における変分原理から導かれる。運動方程式は位相空間において連続的な流れを生成し、その流れは位相空間の体積を保存するシンプレクティック変換になっている[1, 2]。運動方程式を考えもなしに離散化すると、生成される近似的な変換はシンプレクティックではなくなるので、少なくとも軌道の長時間追跡はできないというのが常識になっている。そして、もとの微分方程式のもつ幾何学的な構造を保存する数値計算法という宏大な分野が形成されつつある[3]。

本章では、運動方程式(1)の離散化という道筋ではなく、変分問題における作用積分そのものを数値的に停留にする

ことによって運動を決定する方法（離散変分原理）について解説する。変分原理には配位空間における変分原理（Lagrange 形式）と位相空間における変分原理（Hamilton 形式）とがあり、両者について離散変分原理が研究されている[4]。プラズマ物理学および核融合での重要なテーマである荷電粒子の案内中心軌道解析では Hamilton 形式が本質的であるので、本稿の議論も位相空間における変分問題に限定する。特に、文献[5]で取り上げられている変分原理は応用範囲が広いと思われるので、これを中心に解説する。

Hamilton の運動方程式(1)は、 $(q_0, p_0)$  から  $(q_T, p_T)$  までの経路  $(q(t), p(t))$  が作用積分を停留にする条件から導かれる。一方、離散 Hamilton 力学では、停留にされた、有限時間にわたる作用積分  $\mathcal{A}$  に着目する。この積分は、途中の経路に依存せず、端点  $q_0, p_T$  だけの関数であり ( $\mathcal{A} = \mathcal{A}(q_0, p_T)$ )、他方の端点  $q_T, p_0$  は  $\mathcal{A}$  の偏微分係数で与えられる。それゆえ、作用積分を近似的に停留にする経路を Galerkin 法に従って作れば、それは厳密な経路に対する離散的な近似解を与える。この方法の特徴は、生成される離散的な流れがシンプレクティックであることである。この離散 Hamilton 力学のエッセンスを第2節で述べる。第3節で作用積分を離散的に停留にする Galerkin 時間積分法を議論する。経路を表現する基底関数をうまく選ぶことによって得られる Symplectic Partitioned Runge-Kutta (SPRK) 法を第4節で述べ、その簡単なバージョンである

Störmer-Verlet 法を調和振動子に適用した例を第 5 節に示す. 第 6 節でまとめと議論を行う. 解説にあたっては, 文献[1]で述べられている解析力学の知識だけを前提とし, できる限り平易に (つまり多様体とか微分形式の道具を使わずに) 述べることを心掛けた. ただ, シンプレクティック条件の証明には文献[2]で展開されている外微分法を用いた.

### 3.2 離散 Hamilton 力学

位相空間  $(q, p)$  における作用積分

$$\mathcal{A}[q(\cdot), p(\cdot)] = q_T p_T - \int_0^T \left[ p(t) \frac{dq}{dt} - H(q(t), p(t)) \right] dt \quad (2)$$

について, 経路を  $q(t), p(t)$  から  $q(t) + \delta q(t), p(t) + \delta p(t)$  に変化させたときの  $\mathcal{A}$  の変化は

$$\delta \mathcal{A} = q_T \delta p_T + p_0 \delta q_0 - \int_0^T \left[ \left( \frac{dq}{dt} - \frac{\partial H}{\partial p} \right) \delta p - \left( \frac{dp}{dt} + \frac{\partial H}{\partial q} \right) \delta q \right] dt \quad (3)$$

である. この表式から 2 つの定理を得る.

**定理 1** 作用積分  $\mathcal{A}$  を停留にする経路  $q(t), p(t)$  は Hamilton の運動方程式(1)の解として与えられる. このとき, 境界条件

$$\delta q_0 = 0, \quad \delta p_T = 0 \quad (4)$$

を課すものとする.

また, 上式は次の解釈を許す.

**定理 2** 端点  $q_0, p_T$  が固定された経路  $q(t), p(t)$  が作用積分(2)を停留にする場合,  $\mathcal{A}$  は  $q_0, p_T$  だけの関数であり (時間  $T$  はパラメータである)

$$\frac{\partial \mathcal{A}}{\partial q_0}(q_0, p_T) = p_0, \quad \frac{\partial \mathcal{A}}{\partial p_T}(q_0, p_T) = q_T \quad (5)$$

が成立する. したがって極値になっている作用積分  $\mathcal{A}(q_0, p_T; T)$  を用いて初期値問題を解くことができる. この関数  $\mathcal{A}(q_0, p_T; T)$  を Type II の **generating function** (生成関数あるいは母関数)とよぶ[5].

#### 例 1

調和振動子  $H(q, p) = (q^2 + p^2)/2$  の場合, Hamilton の運動方程式(1)の解は

$$q(t) = a \sin(t + \alpha), \quad p(t) = a \cos(t + \alpha)$$

であり, 振幅  $a$  および初期位相  $\alpha$  は定数である. これらを (2)式に使うと

$$\mathcal{A} = \frac{1}{2} q_T p_T + \frac{1}{2} q_0 p_0 \quad (6)$$

を得る.  $\mathcal{A}$  を  $q_0$  と  $p_T$  の関数として表したいので

$$p_0 = \frac{\sin T}{\cos T} q_0 + \frac{1}{\cos T} p_T \quad (7)$$

$$q_T = \frac{1}{\cos T} q_0 + \frac{\sin T}{\cos T} p_T \quad (8)$$

を(6)式に代入して

$$\mathcal{A}(q_0, p_T; T) = \frac{1}{2} \frac{\sin T}{\cos T} (q_0)^2 + \frac{1}{\cos T} q_0 p_T + \frac{1}{2} \frac{\sin T}{\cos T} (p_T)^2 \quad (9)$$

を得る. そして

$$p_0 = \frac{\partial \mathcal{A}}{\partial q_0} = \frac{\sin T}{\cos T} q_0 + \frac{1}{\cos T} p_T$$

および

$$q_T = \frac{\partial \mathcal{A}}{\partial p_T} = \frac{1}{\cos T} q_0 + \frac{\sin T}{\cos T} p_T$$

より(7, 8)式を確認する.

位相空間において離散的な経路からなる集合 (経路の空間) を次のように作る<sup>1</sup>.

時間間隔  $[0, T]$  を有限個の時刻

$$0 = t_0 < t_1 < \dots < t_N = T$$

で分割し, 各時刻  $t_k$  における経路の値を  $q(t_k) = q_k, p(t_k) = p_k$  とする. そして, 時間間隔  $[t_k, t_{k+1}]$  における経路は  $q_k$  と  $q_{k+1}$  (および,  $p_k$  と  $p_{k+1}$ ) を区分的に滑らかな (すなわち,  $t$  について連続的に微分可能な) 曲線で結ばれたものであるとする. 位相空間内の 2 点  $(q_k, p_k)$  と  $(q_{k+1}, p_{k+1})$  を結ぶ滑らかな曲線は任意であり得るが, その曲線のうち,  $q_k$  と  $p_{k+1}$  が固定された時, 時間  $[t_k, t_{k+1}]$  にわたる作用積分(2)を停留にする曲線を選ぶものとし, 極値である作用積分

$$H_d^+(q_k, p_{k+1}) = \text{ext} \left\{ p_{k+1} q_{k+1} - \int_{t_k}^{t_{k+1}} \left[ p \frac{dq}{dt} - H(q, p) \right] dt \right\} \quad (10)$$

を **離散 Hamiltonian** と呼ぶことにする (極値であることが記号 ext で表されている). したがって,  $H_d^+(q_k, p_{k+1})$  は一それが厳密 (exact) に計算されているとして<sup>2</sup>—Type II の生成関数であるので

$$p_k = \frac{\partial H_d^+}{\partial q_k}(q_k, p_{k+1}) \equiv \mathcal{D}_1 H_d^+(q_k, p_{k+1}), \quad (11)$$

1 経路の離散化と積分については文献[7]が参考になる  
2 もちろん, この計算方法が次のテーマになる.

$$q_{k+1} = \frac{\partial H_d^+}{\partial p_{k+1}}(q_k, p_{k+1}) \equiv \mathcal{D}_2 H_d^+(q_k, p_{k+1}) \quad (12)$$

が成立する。つぎに、作用積分(2)

$$\begin{aligned} \mathcal{A}[q(\cdot), p(\cdot)] &= p_N q_N \\ &\quad - \sum_{k=0}^{N-1} \int_{t_k}^{t_{k+1}} \left[ p \frac{dq}{dt} - H(q(t), p(t)) \right] dt \quad (13) \end{aligned}$$

を

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_d(\{(q_k, p_k)\}_{k=1}^N) &= p_N q_N \\ &\quad - \sum_{k=0}^{N-1} [p_{k+1} q_{k+1} - H_d^+(q_k, p_{k+1})] \quad (14) \end{aligned}$$

に置き換える。この結果、 $\mathcal{A}_d$ は $\{(q_k, p_k)\}_{k=1}^N$ を引数とする関数となる。その引数を変化させたときの $\mathcal{A}_d$ の変化は

$$\begin{aligned} \delta \mathcal{A}_d &= \mathcal{D}_1 H_d^+(q_0, p_1) \delta q_0 + \mathcal{D}_2 H_d^+(q_{N-1}, p_N) \delta p_N \\ &\quad - \sum_{k=1}^{N-1} (q_k - \mathcal{D}_2 H_d^+(q_{k-1}, p_k)) \delta p_k \\ &\quad - \sum_{k=1}^{N-1} (p_k - \mathcal{D}_1 H_d^+(q_k, p_{k+1})) \delta q_k \quad (15) \end{aligned}$$

で与えられる。ところで、厳密に求められた $H_d^+$ については、(11, 12)式が成立するので

$$\delta \mathcal{A}_d = \mathcal{D}_1 H_d^+(q_0, p_1) \delta q_0 + \mathcal{D}_2 H_d^+(q_{N-1}, p_N) \delta p_N \quad (16)$$

となる。それゆえ、境界条件 $\delta q_0 = 0$ 、 $\delta p_N = 0$ のもとで作用積分 $\mathcal{A}_d(\{(q_k, p_k)\}_{k=1}^N)$ は一そして $\mathcal{A}[q(\cdot), p(\cdot)]$ も一停留値をとる(停留である条件のもとでは(13)式と(14)式とは同値である)。よって、次の基本的な結果を得る。

**定理 3** (11, 12)式から生成される一連の離散的な軌道 $\{(q_k, p_k)\}_{k=0}^N$ は連続的なHamiltonian $H(q, p)$ に対するHamiltonの運動方程式の解 $(q(\cdot), p(\cdot))$ の標本点になっている、すなわち

$$q_k = q(t_k), \quad p_k = p(t_k) \quad (17)$$

が厳密に成立する。

## 例 2

再び調和振動子を取り上げる。例 1 から厳密な生成関数 $H_d^+(q_k, p_{k+1})$ は既知であり

$$\begin{aligned} H_d^+(q_k, p_{k+1}) &= \frac{1}{2} \frac{\sin T_k}{\cos T_k} ((q_k)^2 + (p_{k+1})^2) \\ &\quad + \frac{1}{\cos T_k} (q_k p_{k+1}) \quad (18) \end{aligned}$$

である( $T_k = t_{k+1} - t_k$ )。したがって

$$p_k = \mathcal{D}_1 H_d^+(q_k, p_{k+1}) = \frac{\sin T_k}{\cos T_k} q_k + \frac{1}{\cos T_k} p_{k+1} \quad (19)$$

$$q_{k+1} = \mathcal{D}_2 H_d^+(q_k, p_{k+1}) = \frac{1}{\cos T_k} q_k + \frac{\sin T_k}{\cos T_k} p_{k+1} \quad (20)$$

を得る。(19)式を $p_{k+1}$ について解き、それを(20)式右辺に用いて、結局

$$q_{k+1} = q_k \cos T_k + p_k \sin T_k \quad (21)$$

$$p_{k+1} = -q_k \sin T_k + p_k \cos T_k \quad (22)$$

を得る。そして、これらは連続的な経路

$$q(t) = q_0 \cos t + p_0 \sin t$$

$$p(t) = -q_0 \sin t + p_0 \cos t$$

の $t = t_{k+1}$ での標本点になっている。

さて、次の命題を得ることができるが、これが離散的な近似計算法を研究する上での基本定理(変分法的な離散Hamilton力学)となると思われる。

**定理 4**  $H_d^+$ が(10)式で定義される「厳密な」離散Hamiltonianであるという条件を緩めて、それを近似する $q_k, p_{k+1}$ の関数とする。このとき、離散的なHamiltonの運動方程式

$$q_k = \mathcal{D}_2 H_d^+(q_{k-1}, p_k), k = 1, \dots, N-1 \quad (23)$$

$$p_k = \mathcal{D}_1 H_d^+(q_k, p_{k+1}), k = 1, \dots, N-1 \quad (24)$$

から決まる離散軌道は、境界条件 $\delta q_0 = 0$ 、 $\delta p_N = 0$ のもとで離散的な作用積分(14)を停留にする。

もちろんこの場合、停留にされた作用積分(14)はもとの作用積分(13)の停留値に一致しないので、離散的な軌道 $\{(q_k, p_k)\}_{k=0}^N$ は標本点(17)にならないが、その近似値であることが期待される。さらに、方程式(23, 24)が、Hamiltonの運動方程式を数値的に解く従来の方法にくらべて勝っているのは、この方程式から決定される離散軌道がシンプレクティック幾何学(すなわち、シンプレクティック条件)に従うからである[2, 1]。次にこれを確認する。

停留にされた作用積分(14)は端点 $q_0, p_N$ の関数であるので、それを $\mathcal{S}_d(q_0, p_N)$ と表記する：

$$\mathcal{S}_d(q_0, p_N) = \text{ext} \left\{ p_N q_N - \sum_{k=0}^{N-1} [p_{k+1} q_{k+1} - H_d^+(q_k, p_{k+1})] \right\} \quad (25)$$

そして、定理 2 の議論を踏襲して、 $\mathcal{S}_d$ の $q_0$ に関する偏微分係数を求める。直接的な計算から

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{S}_d}{\partial q_0} &= - \sum_{k=1}^{N-1} \frac{\partial p_k}{\partial q_0} (q_k - \mathcal{D}_2 H_d^+(q_{k-1}, p_k)) \\ &\quad - \sum_{k=1}^{N-1} \frac{\partial q_k}{\partial q_0} (p_k - \mathcal{D}_1 H_d^+(q_k, p_{k+1})) \\ &\quad + \mathcal{D}_1 H_d^+(q_0, p_1) \quad (26) \end{aligned}$$

同様に

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{S}_d}{\partial p_N} = & - \sum_{k=1}^{N-1} \frac{\partial p_k}{\partial p_N} (q_k - \mathcal{D}_2 H_d^+(q_{k-1}, p_k)) \\ & - \sum_{k=1}^{N-1} \frac{\partial q_k}{\partial p_N} (p_k - \mathcal{D}_1 H_d^+(q_k, p_{k+1})) \\ & + \mathcal{D}_2 H_d^+(q_{N-1}, p_N) \end{aligned} \quad (27)$$

したがって,  $\{(q_k, p_k)\}_{k=1}^N$  が離散 Hamilton 運動方程式 (23, 24) を満たせば

$$\frac{\partial \mathcal{S}_d}{\partial q_0} = \mathcal{D}_1 H_d^+(q_0, p_1) \quad (28)$$

$$\frac{\partial \mathcal{S}_d}{\partial p_N} = \mathcal{D}_2 H_d^+(q_{N-1}, p_N) \quad (29)$$

を得る. さて,  $k=1$  のときの (23) 式と  $k=N-1$  のときの (24) 式は

$$\begin{aligned} q_1 &= \mathcal{D}_2 H_d^+(q_0, p_1) \\ p_{N-1} &= \mathcal{D}_1 H_d^+(q_{N-1}, p_N) \end{aligned}$$

である. そこで, 我々は, これらの運動方程式に加えて, そのペアとなる運動方程式

$$p_0 = \mathcal{D}_1 H_d^+(q_0, p_1) \quad (30)$$

$$q_N = \mathcal{D}_2 H_d^+(q_{N-1}, p_N) \quad (31)$$

を課すことにする. そうすることにより, 離散 Hamilton 運動方程式の完全なペア

$$q_{k+1} = \mathcal{D}_2 H_d^+(q_k, p_{k+1}), k=0, \dots, N-1 \quad (32)$$

$$p_k = \mathcal{D}_1 H_d^+(q_k, p_{k+1}), k=0, \dots, N-1 \quad (33)$$

を得て, さらに

$$\frac{\partial \mathcal{S}_d}{\partial q_0} = p_0, \quad \frac{\partial \mathcal{S}_d}{\partial p_N} = q_N \quad (34)$$

が成立する. (34) 式を外微分法の観点からみれば [2], 外微分  $d$  をスカラー関数  $\mathcal{S}_d(q_0, p_N)$  に施して

$$d\mathcal{S}_d = \frac{\partial \mathcal{S}_d}{\partial q_0} dq_0 + \frac{\partial \mathcal{S}_d}{\partial p_N} dp_N = p_0 dq_0 + q_N dp_N \quad (35)$$

を得る. さらに, 外微分  $d$  を施し,  $dd=0$  および  $dp_0 \wedge dq_0 = -dq_0 \wedge dp_0$  を使うと

$$0 = dq_N \wedge dp_N - dq_0 \wedge dp_0$$

を得る. これから次のことが成立する.

**定理 5** 離散 Hamilton 方程式 (32, 33) の解から作られる一連の離散的な写像

$$(q_0, p_0) \rightarrow (q_1, p_1) \rightarrow \dots \rightarrow (q_N, p_N)$$

はシンプレクティック条件

$$dq_0 \wedge dp_0 = dq_1 \wedge dp_1 = \dots = dq_N \wedge dp_N \quad (36)$$

を満たす.

ここで, これまでの議論の道筋をひっくり返そう.

位相空間において与えられた関数  $H_d^+(\cdot, \cdot)$  を基にして, 離散 Hamilton 運動方程式 (32, 33) を解いて, 初期値  $(q_0, p_0)$  から順次, 離散軌道  $\{(q_k, p_k)\}_{k=0}^N$  を求めると, それは離散作用積分 (14) を停留にし, かつシンプレクティック条件を満たす.

さらに, 離散 Hamiltonian  $H_d^+(\cdot, \cdot)$  が, 我々にとって関心のある連続的な Hamiltonian  $H(q, p)$  から作られる生成関数 (10) であれば,  $H_d^+$  が生成する離散軌道  $\{(q_k, p_k)\}_{k=0}^N$  は,  $H(q, p)$  が生成する連続的な軌道  $(q(t), p(t))$  の標本点 (17) である.

したがって我々の課題は (10) 式にできるだけ近い離散 Hamiltonian  $H_d^+$  を求めることに帰着する. (10) 式は変分問題であるので, いわゆる Galerkin 法が有力な方法となる.

### 3.3 Galerkin 時間積分法

以下では議論を簡単にするため, 位相空間は 2-次元, すなわち, 力学変数は  $q, p$  の二つとする. 多次元への拡張は容易と予想する.

$\psi_i(\tau)$  を時間区間  $\tau \in [0, 1]$  における経路の基底関数とする. すなわちこの区間における関数  $f(\tau)$  は

$$f(\tau) = \sum_{i=1}^s f_i \psi_i(\tau) \quad (37)$$

と近似的に表現される. ここで, 整数  $s$  は基底関数の個数を表す. そして, 経路の積分の評価には数値積分公式

$$\int_0^1 f(\tau) d\tau = \sum_{j=1}^s b_j f(c_j) \quad (38)$$

を用いるものとする. ここで,  $c_j$  および  $b_j$  は, それぞれ, 積分公式の標本点および重みである. たとえば,  $\psi_i(\tau)$  として Legendre 多項式を選ぶと, (38) 式はよく知られた Gauss-Legendre 公式になる [6]. なお, (37) 式の基底関数の個数と (38) 式の標本点の個数とを等しく取っている ((46) 式参照). 我々は, 積分

$$S = \int_0^h \left[ p(t) \frac{dq}{dt} - H(q(t), p(t)) \right] dt \quad (39)$$

および

$$\begin{aligned} K &= p_1 q_1 - \int_0^h \left[ p(t) \frac{dq}{dt} - H(q(t), p(t)) \right] dt \\ &= p_1 q_1 - S \end{aligned} \quad (40)$$

の Galerkin 近似を求めたい. これを以下の手順により実行する.

#### step 1

$[0, h]$  における  $dq/dt$  の経路を

$$\frac{dq_d}{dt}(\tau h) = \sum_{i=1}^s V^i \psi_i(\tau), \quad 0 \leq \tau \leq 1 \quad (41)$$

と近似的に表現する．ここで， $V^i$  ( $i = 1, s$ ) は未知数である．

### step 2

(41)式を時間積分して

$$q_d(\tau h) = q_d(0) + h \sum_{i=1}^s V^i \int_0^\tau \phi_i(\rho) d\rho \quad (42)$$

および， $\tau = 1$  の場合について

$$\begin{aligned} q_1 = q_d(h) &= q_d(0) + h \sum_{i=1}^s V^i \int_0^1 \phi_i(\rho) d\rho \\ &= q_0 + h \sum_{i=1}^s B_i V^i \end{aligned} \quad (43)$$

ここで

$$B_i = \int_0^1 \phi_i(\tau) d\tau \quad (44)$$

である．また，我々は，時間間隔 $[0, h]$ に内部の点（それは，ちょうど数値積分の標本点に一致する） $c_i$ を設定し，そこでの位置を

$$\begin{aligned} Q^i = q_d(c_i h) &= q_d(0) + h \sum_{j=1}^s V^j \int_0^{c_i} \phi_j(\tau) d\tau \\ &= q_0 + h \sum_{j=1}^s A_{ij} V^j \end{aligned} \quad (45)$$

とする．したがって

$$A_{ij} = \int_0^{c_i} \phi_j(\tau) d\tau, \quad i, j = 1, \dots, s \quad (46)$$

は $s \times s$ の行列である．そして，この行列が可逆となるように，基底関数族 $\{\phi_i(\tau)\}$ および点列 $\{c_i\}$ が選ばれるものとする．

### step 3

$$P^i = p(c_i h) \quad (47)$$

と置く ( $P^i$  も未知数)．積分(39)式において

$$\begin{aligned} \int_0^h p(t) \frac{dq}{dt}(t) dt &= h \int_0^1 p(\tau h) \frac{dq_d}{dt}(\tau h) d\tau \\ &= h \sum_{i=1}^s b_i p(c_i h) \frac{dq_d}{dt}(c_i h) \\ &= h \sum_{i=1}^s b_i P^i \sum_{j=1}^s V^j \phi_j(c_i) \end{aligned} \quad (48)$$

2番目の等号では数値積分公式(38)を適用した．同様に

$$\begin{aligned} \int_0^h H(q(t), p(t)) dt &= h \int_0^1 H(q(\tau h), p(\tau h)) d\tau \\ &= h \sum_{i=1}^s b_i H(q_d(c_i h), p(c_i h)) \\ &= h \sum_{i=1}^s b_i H(Q^i, P^i) \end{aligned} \quad (49)$$

(48), (49)式を(40)式に用いると， $V^i, P^i$ の関数として

$$\begin{aligned} K(q_0, p_1; V^i, P^i) &= p_1 \left( q_0 + h \sum_{i=1}^s B_i V^i \right) \\ &\quad - h \sum_{i=1}^s b_i \left[ P^i \sum_{j=1}^s V^j \phi_j(c_i) - H(Q^i, P^i) \right] \end{aligned} \quad (50)$$

を得る．ただし，(45)式より $Q^i$ は $q_0$ および $\{V^j\}$ の関数である．

前節の結果より，離散Hamiltonian  $H_d^+(q_0, p_1)$ は $K$ を $V^i, P^i$ について停留にすることによって得られる：

$$H_d^+(q_0, p_1) = \text{ext}_{V^i, P^i} K(q_0, p_1; V^i, P^i) \quad (51)$$

そして，停留の条件は

$$\begin{aligned} 0 = \frac{\partial K}{\partial V^j} &= h p_1 B_j - h \sum_{i=1}^s b_i \left[ P^i \phi_j(c_i) \right. \\ &\quad \left. - h A_{ij} \frac{\partial H}{\partial q}(Q^i, P^i) \right], \quad j = 1, \dots, s \end{aligned} \quad (52)$$

および

$$0 = \frac{\partial K}{\partial P^j} = -h b_j \left[ \sum_{i=1}^s V^i \phi_i(c_j) - \frac{\partial H}{\partial p}(Q^i, P^i) \right], \quad j = 1, \dots, s \quad (53)$$

である．

### step 4

連立方程式(52), (53)を， $q_0, p_1$ が与えられたものとして， $V^i, P^i$ について解く，すなわち

$$V^i = V^i(q_0, p_1), \quad P^i = P^i(q_0, p_1)$$

これらを(50)右辺に代入すれば， $H_d^+(q_0, p_1)$ を得る：

$$H_d^+(q_0, p_1) = K(q_0, p_1; V^i(q_0, p_1), P^i(q_0, p_1)) \quad (54)$$

ここで必要なのは， $H_d^+(q_0, p_1)$ を陽に書き下すことではなく，その $q_0$ および $p_1$ についての偏微分係数である．それらは $p_0, q_1$ を与える：

$$\begin{aligned} p_0 &= \frac{\partial}{\partial q_0} H_d^+(q_0, p_1) \\ &= p_1 + h \sum_{i=1}^s b_i \frac{\partial H}{\partial q}(Q^i, P^i) \end{aligned} \quad (55)$$

ここで，停留条件(52), (53)を用いた．同様にして

$$q_1 = \frac{\partial}{\partial p_1} H_d^+(q_0, p_1) = q_0 + h \sum_{i=1}^s B_i V^i \quad (56)$$

(55)式を $p_1$ について解けば，写像 $(q_0, p_0) \rightarrow (q_1, p_1)$ を求めたことになる．それは次のようにまとめられる．

$$q_1 = q_0 + h \sum_{i=1}^s B_i V^i \quad (57)$$

$$p_1 = p_0 - h \sum_{i=1}^s b_i \frac{\partial H}{\partial q}(Q^i, P^i) \quad (58)$$

$Q^i, V^i, P^i$  に対する方程式

$$Q^i = q_0 + h \sum_{j=1}^s A_{ij} V^j, \quad i = 1, \dots, s \quad (59)$$

$$0 = \sum_{i=1}^s \phi_i(c_j) V^i - \frac{\partial H}{\partial p}(Q^j, P^j), \quad j = 1, \dots, s \quad (60)$$

$$0 = \sum_{i=1}^s b_i P^i \phi_j(c_i) - p_0 B_j \\ + h \sum_{i=1}^s b_i (B_j - A_{ij}) \frac{\partial H}{\partial q}(Q^i, P^i), \quad j = 1, \dots, s \quad (61)$$

(60), (61)式は  $H_d^+$  が停留条件(51)を満たすことを表しており, (61)式は(58)式を使って(52)式に現れている  $p_1$  を消去したものである.

### 3.4 Symplectic Partitioned Runge-Kutta (SPRK) 法

以上から明らかなように, 基底関数族  $\{\phi_j\}_{j=1}^s$  の関数形と個数  $s$ , 数値積分公式(38)における標本点  $\{c_j\}$  および重み  $\{b_j\}$  を与えれば, 公式(57)-(61)により, シンプレクティックな写像  $(q_0, p_0) \rightarrow (q_1, p_1)$  を生成する時間積分法(symplectic integrator)を作ることができる.

特に, 基底関数を

$$\phi_i(c_j) = \delta_{ij} \quad (62)$$

であるように選ぶと, 一連の公式は簡単化される. この場合, 数値積分公式(38)の重み  $b_i$  は(44)式で定義される  $B_i$  で与えられることがわかる (Appendix A). 次に, 方程式(60)は  $V^i$  について陽に解けて

$$V^i = \frac{\partial H}{\partial p}(Q^j, P^j) \quad (63)$$

を得る. これを(59), (61)式に用いて

$$Q^i = q_0 + h \sum_{j=1}^s a_{ij} \frac{\partial H}{\partial p}(Q^j, P^j) \quad (64)$$

$$P^i = p_0 - h \sum_{j=1}^s \tilde{a}_{ij} \frac{\partial H}{\partial q}(Q^j, P^j) \quad (65)$$

$$i = 1, \dots, s$$

および

$$q_1 = q_0 + h \sum_{i=1}^s b_i \frac{\partial H}{\partial p}(Q^i, P^i) \quad (66)$$

$$p_1 = p_0 - h \sum_{i=1}^s b_i \frac{\partial H}{\partial q}(Q^i, P^i) \quad (67)$$

を得る. ここで

$$a_{ij} = \int_0^{c_i} \phi_j d\tau \quad (68)$$

$$\tilde{a}_{ij} = \frac{b_i b_j - b_j a_{ji}}{b_i} \quad (69)$$

である. 公式(64)-(67)は  $s$ -次 Symplectic Partitioned Runge-Kutta (SPRK) 法と呼ばれる[3, 5] (partitioned という用語は, 内部の点  $Q^i$  の計算公式と  $P^i$  の計算公式とが異なることに由来するようである).

### 3.5 簡単な例: Störmer-Verlet 法

このスキームは  $s = 2$  であり, 標本点として

$$c_1 = 0, \quad c_2 = 1 \quad (70)$$

基底関数として

$$\phi_1(\tau) = \frac{1}{2}(1 + \cos(\pi\tau))$$

$$\phi_2(\tau) = \frac{1}{2}(1 - \cos(\pi\tau)) \quad (71)$$

を選ぶ. これより

$$b_1 = b_2 = \frac{1}{2} \quad (72)$$

および

$$\tilde{a}_{1,1} = \tilde{a}_{2,1} = \frac{1}{2}, \quad \tilde{a}_{2,1} = \tilde{a}_{2,2} = 0 \quad (73)$$

を得る. したがって, Störmer-Verlet 法の時間積分スキームは次のようになる.

$$Q^1 = q_0 \quad (74)$$

$$P^1 = p_0 - \frac{h}{2} \frac{dV}{dq}(q_0) \quad (75)$$

$$P^2 = p_0 - \frac{h}{2} \frac{dV}{dq}(q_0) \quad (76)$$

$$Q^2 = q_0 + \frac{h}{2}(P^1 + P^2) \\ = q_0 - \frac{h^2}{2} \frac{dV}{dq}(q_0) + hp_0 \quad (77)$$

$$q_1 = q_0 + \frac{h}{2}(P^1 + P^2) = Q^2 \quad (78)$$

$$p_1 = p_0 - \frac{h}{2} \left( \frac{dV}{dq}(Q^1) + \frac{dV}{dq}(Q^2) \right) \quad (79)$$

すなわち, このスキームは陽解法である.

調和振動子 ( $dV/dq = q$ ) の場合

$$Q^1 + Q^2 = 2 \left( 1 - \frac{h^2}{4} \right) q_0 + hp_0$$

より

$$q_1 = \left( 1 - \frac{h^2}{2} \right) q_0 + hp_0 \quad (80)$$

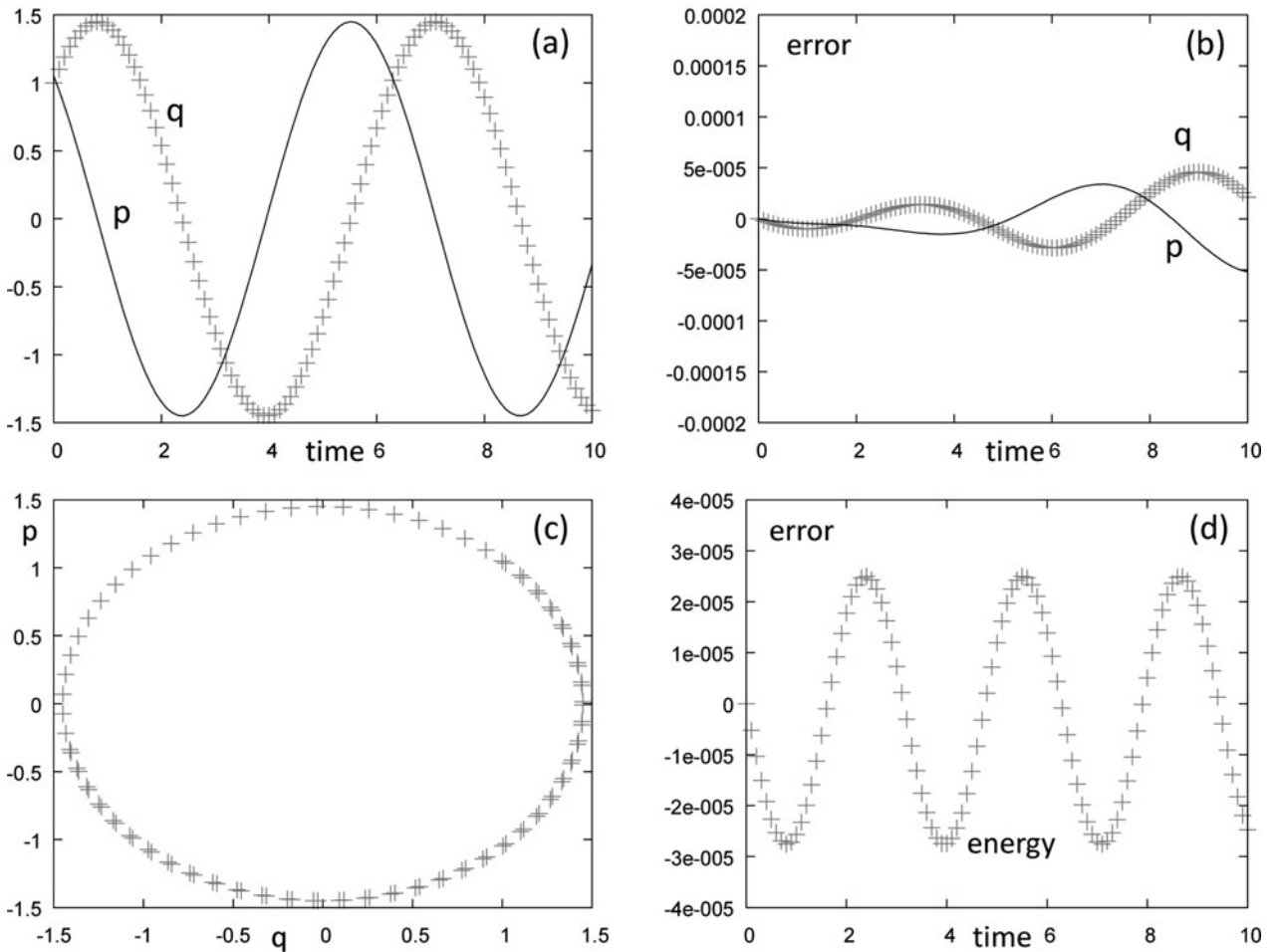
Two-stage Stormer-Verlet scheme ( $h = 0.01$ )

図1 Störmer-Verlet 法で求めた調和振動子の離散解 ( $h = 0.01$ ) . (a) :  $q(t)$ ,  $p(t)$  の離散解. 初期値は  $q(0) = p(0) = 1.0$  である. (b) : 離散解の厳密解からの誤差, (c) : 位相空間  $(q, p)$  上の軌跡, (d) : エネルギーの時間変化. エネルギーは保存されないが, 単調に増大あるいは減少することなく, 厳密値のまわりで振動する.

$$p_1 = -h \left(1 - \frac{h^2}{4}\right) q_0 + \left(1 - \frac{h^2}{2}\right) p_0 \quad (81)$$

この写像  $(q_0, p_0) \rightarrow (q_1, p_1)$  によるエネルギーの変化は次式で表される.

$$(q_1)^2 + (p_1)^2 = (q_0)^2 + (p_0)^2 + \left(\frac{h^3}{2} - \frac{h^5}{4}\right) (q_0 p_0) + \frac{h^4}{4} ((p_0)^2 - (q_0)^2) + \frac{h^6}{16} (q_0)^2 \quad (82)$$

図1に初期値  $q(t=0) = p(t=0) = 1.0$  および  $h = 0.01$  の場合の(80,81)式から得られた(a) :  $q(t)$ ,  $p(t)$  の時間発展, (b) : それらの厳密解からの誤差, (c) : 位相空間  $(q, p)$  上の軌跡, そして(d) : エネルギーの時間変化を示す. 注目すべきことは, エネルギーは保存されないが, 単調に増大あるいは減少せずに, 厳密値の周りで振動することである. これはシンプレクティック写像の特徴であり, これが長時間にわたって軌道を追跡することを可能にすると思なされる.

### 3.6 まとめと議論

時間間隔  $h$  を有限値に固定したまま基底関数族

$\{\psi_i(\tau)\}_{i=1,s}$  の個数および標本点  $\{c_i\}_{i=1,s}$  の個数 (次数)  $s$  を増大させたとき, 作用積分  $K$  の極値(51)が連続な場合の作用積分の極値に収束すれば, Galerkin 時間積分法で作られる一連の離散的な経路  $(q_k, p_k)$  は定理3より Hamilton の運動方程式の解の標本点になる. この意味で, 有限な  $h$  の場合の Galerkin 時間積分法の収束性が保証される. その次の数値解析学としての重要なテーマとして, 具体的な時間積分法の精度のオーダーおよびそれが生成する離散解の厳密解からの誤差の挙動があげられよう. これについては文献[3]およびそれに引用されている論文を参照されたい. 代わりにプラズマ物理学・核融合への応用の観点からコメントを二つほど述べたい. 本章で展開した離散 Hamilton 力学は作用積分(2)を起点にしている. これは  $(q, p)$  が正準変数であることを暗黙に仮定していることになる. それゆえ, 非正準形式を使う荷電粒子の案内中心軌道解析には, そのままでは適用できず, 非正準形式を正準形式に変換することが必要になる. 大域的な座標変換のできる場合が文献[8]で論じられているが, 非正準形式を正準形式に局所的に変換して (この場合のほうが応用範囲が広いと予想される) 離散 Hamilton 力学を適用することは, まだ研究されていないようである. また, 離散 Hamilton 力学を多体

系 (interacting system (相互作用系)) のシミュレーションに適用することは興味深いと思われる。もちろん、プラズマ物理学における典型的な分野は PIC シミュレーション [9] であろう。これについては今後の発展を期待するところである。

謝 辞

本章で述べた研究の機会と支援を賜りました、日本原子力研究開発機構の松山顕之博士および矢木雅敏理論シミュレーショングループリーダーに深く感謝します。また、古川勝博士には本講座での発表機会をいただきました。ここに感謝します。

Appendix

3. A : 数値積分公式の補足

基底関数  $\phi_i(\tau)$  が条件(62)を満たしているとする。関数  $f(\tau)$  の近似表現

$$\bar{f}(\tau) = \sum_{i=1}^s f(c_i) \phi_i(\tau) \tag{A.1}$$

は、その値が標本点  $c_j$  においてもとの関数の値に等しいという条件を満たす：

$$\bar{f}(c_j) = f(c_j) \tag{A.2}$$

このとき

$$\begin{aligned} \int_0^1 \bar{f}(\tau) d\tau &= \sum_{i=1}^s f(c_i) \int_0^1 \phi_i(\tau) d\tau \\ &= \sum_{i=1}^s b_i f(c_i) \end{aligned} \tag{A.3}$$

であるので、関数  $f(\tau)$  の定積分を

$$\int_0^1 f(\tau) d\tau \approx \int_0^1 \bar{f}(\tau) d\tau = \sum_{i=1}^s b_i f(c_i) \tag{A.4}$$

で評価すると、これは積分公式(38)の重み  $b_i$  として

$$b_i = \int_0^1 \phi_i d\tau \tag{A.5}$$

を選んだことになる。(A.4)式が数値積分公式として意味のあるものにするために、 $f(\tau)$  が特定の関数 (たとえば、定数関数とか低次の多項式) の場合に、公式が厳密な積分値を与える条件を課するのが通常である。 $f(\tau) \equiv 1$  の場合、積分公式が

$$\int_0^1 f(\tau) d\tau = 1$$

を与えるためには、重み  $b_i$  が条件

$$\sum_{i=1}^s b_i = 1 \tag{A.6}$$

を満たすことが必要である。これは、SPRK 法が少なくともオーダー  $h$  の時間積分法であることを保証する条件であり [5], SPRK 法の適合条件 (condition for consistency of SPRK method) と呼ばれる。

参考文献

- [1] 山内恭彦：一般力学 増訂第3版, (岩波書店, 2002年).
- [2] V.I. Arnold, *Mathematical Methods of Classical Mechanics* (2nd edn. Graduate Texts in Mathematics, vol. 60, New York, USA, 1989), chap.9.
- [3] E. Hairer *et al.*, *Geometric Numerical Integration* (2nd edn, Springer Series in Computational Mechanics, vol. 31, Berlin, Germany, 2006).
- [4] J.E. Marsden and M. West, *Acta Numerica* **10**, 1 (2001).
- [5] M. Leok and J. Zhang, *JMA J. Numerical Analysis* **31**, 1497 (2011).
- [6] W.H. Press *et al.*, *Numerical Recipes* (Cambridge university Press, Ney York, 1992) Chap.4.
- [7] R.P. Feynman *et al.*, *Quantum Mechanics and Path Integrals: Emended Edition* (Dover, USA, 2010).
- [8] R. White and L. E. Zakharov, *Phys. Plasmas* **10**, 573 (2003).
- [9] 内藤裕志, 佐竹真介：プラズマ・核融合学会誌 **89**, 245 (2013).



とく だ しん じ  
徳 田 伸 二

(一財)高度情報科学技術研究機構 主任研究員。1978年大阪大学大学院工学系博士課程中退 工学博士。日本原子力研究所を経て2012年より現職。専門は磁場閉じ込めプラズマの磁気流体力学安定性理論。また、荷電粒子運動の現代的(幾何学的)な数値解法にも興味があります。街(それも裏道とか横丁とか)をブラブラするのが好きで、ときどき行き止まりにぶつかり、家内に叱られます。