

q^4 ポテンシャル系におけるシンプレクティック差分の収束半径

Convergence radius of the symplectic integrator for the q^4 -potential system

小林礼人 ・コバヤシヒロト・KobayashiHiroto

SUBJECT

q^4 ポテンシャル系では初期条件によってシンプレクティック差分の収束半径が異なること

ABSTRACT

Symplectic integrators are known to be useful numerical calculation methods to solve differential equations. In the calculation of evolution of the one-dimensional harmonic oscillator systems, the energy of the system does not deviate largely from the initial value because the integrator has a conserved quantity that is slightly modified original energy. The integrator for the one-dimensional harmonic oscillator system works within a convergence radius that is independent of initial conditions. On the otherhand, no conserved quantity is known for the symplectics integrator for the q^4 -potential systems, and convergence radius for the integrator is not clear. Numerical calculations have been done, and those conclude that the convergence radius of the integrator for the q^4 -potential system depends on initial conditions. Lower-degree terms of the Baker-Campbell-Hausdorff formula of the first-order symplectic integrator for the system are obtained, and those terms are consistent with the dependence of the initial conditions for the convergence radius.

q^4 ポテンシャル系におけるシンプレクティック差分の収束半径

小林 礼人*

Convergence radius of the symplectic integrator for the q^4 -potential system

Hiroto KOBAYASHI*

(Received September 30, 2013)

Symplectic integrators are known to be useful numerical calculation methods to solve differential equations. In the calculation of evolution of the one-dimensional harmonic oscillator system, the energy of the system does not deviate largely from the initial value because the integrator has a conserved quantity that is slightly modified original energy. The integrator for the one-dimensional harmonic oscillator system works within a convergence radius that is independent of initial conditions. On the other hand, no conserved quantity is known for the symplectic integrator for the q^4 -potential system, and the convergence radius for the integrator is not clear. Numerical calculations have been done, and these conclude that the convergence radius of the integrator for the q^4 -potential system depends on initial conditions. Lower-degree terms of the Baker-Campbell-Hausdorff formula of the first-order symplectic integrator for the system are obtained, and these terms are consistent with the dependence of the initial conditions for the convergence radius.

Keywords: symplectic integrator, conserved quantity, convergence radius

*工学部共通教育科 (Science and Technology Section, General Education Division, College of Engineering)

1. はじめに

微分方程式を解くためには、差分化する必要がある。代表的な数値計算法としてはルンゲ・クッタ法が知られているが、ここではシンプレクティック差分法とよばれる方法をいくつかの系に適用した場合のふるまいについて議論する。

2. シンプレクティック差分法

p を運動量, q を座標としてハミルトニアン $H = (p^2 + q^2)/2$ で与えられる 1 次元調和振動子系を考える。運動方程式は

$$\dot{p} = -q, \quad \dot{q} = p$$

である。この系には厳密解があるので本来であれば数値計算を行う必要はないが、あえて数値計算するとしたら、これを差分化し、

$$p_{i+1} = p_i - xq_i, \quad q_{i+1} = q_i + xp_i$$

とするのがオイラー法である。ここで x は時間刻みである。しかし、この方法ではエネルギー $(p^2 + q^2)/2$ が単調増加し、精緻な計算が行えない。そこで用いられるのがシンプレクティック差分法である。1 次差分において、これは次の式で与えられる。

$$p_{i+1} = p_i - xq_i, \quad q_{i+1} = q_i + xp_{i+1}$$

これはオイラー法と同じ 1 次近似であってもエネルギーが単調増加せず、 p, q, x で表される保存量をもつという特長をもっている。

3. 調和振動子系

1 次元調和振動子に対して 2 次のシンプレクティック差分を考えるとき、次の式で与えられる保存量 E_2 があることが知られている。

$$E_2 = \frac{1}{2} \left(p^2 + \left(1 - \frac{x^2}{4} \right) q^2 \right)$$

このような保存量があるため、エネルギーが単調増加してしまうことがないのである。また、保存量 E_2 が表す pq 平面での運動の軌跡が $x = 2$ を境に楕円から双曲

線へと変わることからもわかるように、時間刻みが 2 以上のとき差分スキームが異常性を示すことがわかっている²⁾。なお、この収束半径は 1 次元調和振動子系では初期条件 (p_0, q_0) に依存しない。

シンプレクティック差分を考える際、位相空間上を差分ステップ毎に辿る点を連続的につなげた軌跡を真の力学的軌跡とするハミルトニアンをそのシンプレクティック差分の変形されたハミルトニアン^{3,4)}とよぶ。変形されたハミルトニアンは、元のハミルトニアンの運動エネルギーの項と位置エネルギーの項から Baker-Campbell-Hausdorff 公式を用いて形式的に定めることができる^{1,3,4)}。特に、1 次元調和振動子系ではこの変形されたハミルトニアンが無限次まで厳密に求められている²⁾。これは保存量 E_2 に、時間刻みに依存する定数 $F(x)$ をかけたものである。ここで、 $F(x)$ は

$$F(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(n!)^2}{(2n+1)!} x^{2n}$$

で与えられる。なお、この級数の収束半径は 2 である。

4. q^4 ポテンシャル系

一方、ハミルトニアン $H = p^2/2 + q^4/4$ で与えられる q^4 ポテンシャル系では変形されたハミルトニアンは求められておらず、保存量も知られていない。そこで数値計算を行ったところ、調和振動子系とは異なり差分が破綻する収束半径 x_c が初期条件 (p_0, q_0) に依存することがわかった。2 次差分において依存性はおよそ次のように与えられる。

$$q_0 = 0 \text{ のとき } (x_c^2 p_0)^2 \cong 0.4$$

$$p_0 = 0 \text{ のとき } (x_c q_0)^2 \cong 1.0$$

また、1 次差分の変形されたハミルトニアンのうち p を含まない項を Baker-Campbell-Hausdorff 公式⁵⁾から対応するポアソン括弧を用いて計算し、次の式を得た。

$$\frac{1}{4} q^4 + \frac{x^2}{12} q^6 + \frac{x^4}{20} q^8 + \frac{x^6}{24} q^{10} + \frac{37}{840} x^8 q^{12} + \dots$$

これは、上記収束半径の初期条件依存性と矛盾しない表

式である。変形されたハミルトニアン全体としては p , q がともに含まれるが, 周期運動のうちの最大振幅のときには $p = 0$ となり, q のみで差分の成立不成立を議論することができる。一方, 変形されたハミルトニアンのうち q を含まない項を計算したところ, 次の式を得た。

$$\frac{1}{2}p^2 - \frac{x^4}{120}p^4 + \frac{x^8}{420}p^6 + \cdots$$

これも上記収束半径の初期条件依存性と矛盾せず, かつ, p と q での初期条件依存性の違いをうまく説明する結果となっている。

5. まとめ

結論として, 1次元調和振動子系にシンプレクティック差分を用いた場合には, 初期条件によらず差分が破綻する時間刻みが決まり, 保存量が求められているが, q^4 ポテンシャル系では初期条件によって差分が破綻する時間刻みが異なることがわかった。この初期条件依存性は, Baker-Campbell-Hausdorff公式により説明できるものと考えられる。

参考文献

- 1) 吉田春夫, 数理科学, 第33巻第6号 (1995) 37.
- 2) H. Kobayashi, Phys. Lett. A 371 (2007) 360.
- 3) 吉田春夫, 数理解析研究所講究録, 第1260巻 (2002) 188.
- 4) E. Hairer, Ch. Lubich and G. Wanner, Geometric Numerical Integration, Springer Series in Computational Mathematics 31 (2002).
- 5) P.-V. Koseleff, Ph. D. thesis, Ecole Polytechnique, Paris, 1993.