# 保存系のシンプレクティック時間積分法に関する考察

(株)砂子組　○正会員　田尻　太郎
(株)砂子組　　正会員　古川　大輔
(株)砂子組　　正会員　幌村　瑛奈
(株)砂子組　　正会員　近藤　里史

1．はじめに

ここではベクトル q＝($q_1$，$q_2$，･･･，$q_n$)を($q_k$)などで略記する。質点に働く力が変位($q_k$)だけに依存する時、力を保存力、そのような質点系を保存系と呼ぶ。M，K を質量，剛性マトリックス、q を変位ベクトル、・ は時間微分として、構造系の自由振動方程式(1)は、保存系の一種である。

$$M\ddot{q}+Kq=0 \tag{1}$$

保存系の数値的近似解がシンプレクティック法で計算可能である事はほぼ確立されており、時間推進演算子を使って示されるが [1)]、保存系以外への見通しは良くない。そこでシンプレクティック変換で保存系の近似解が可能な事を Hamilton-Jacobi 方程式[*)]を利用し、より定性的に示す。

保存力はポテンシャル U($q_k$)から導かれる。力学的エネルギーの表式をハミルトニアンと呼び、H(p，q)で表す。保存系のハミルトニアンは、

$$H(p,q)=\sum_j \frac{p_j{}^2}{2m_j}+U(q_k) \quad , \quad j=1,2,\cdots,n \tag{2}$$

の形に書ける [2)]。ここで $m_j$，$p_j$ は j 番目の質点の質量と運動量、n は系の自由度。(2)からは正準形式：($dq_j/dt$，$dp_j/dt$)＝($\partial H/\partial p_j$，$-\partial H/\partial q_j$)により、運動方程式と同等な正準方程式が得られる [2)]。保存系の場合は、

$$\begin{cases} \dot{q}_i=\dfrac{p_i}{m_i} \\ \dot{p}_i=-\dfrac{\partial U(q_k)}{\partial q_i} \end{cases} \quad , \quad i=1,2,\cdots,n \tag{3}$$

となる。変換 S：($p_k$，$q_k$) → ($P_k$，$Q_k$)を行い、それが正準形式を不変に保つときシンプレクティック変換と呼ばれ [2)]、変換 S はその母関数 S($p_k$，$Q_k$)などから、

$$\begin{cases} q_i=-\dfrac{\partial S(p_k,Q_k)}{\partial p_i} \\ P_i=-\dfrac{\partial S(p_k,Q_k)}{\partial Q_i} \end{cases} \quad , \quad i=1,2,\cdots,n \tag{4}$$

などの形で定義される [2)]。変換前のハミルトニアン H(p，q)と変換後のハミルトニアン H'(P，Q)は、次の関係にある [2)]。

$$H'(P_j,Q_j)=H(p_j,q_j) \tag{5}$$

2．一次の陽的シンプレクティック法

ある時刻 t の運動量と変位を($p_k(t)$，$q_k(t)$)とする。($p_k(t)$, $q_k(t)$)から時間間隔 τ 後の($p_k(t+\tau)$，$q_k(t+\tau)$)への変換 S を、保存系で考える。以後、($p_k(t)$，$q_k(t)$)＝($p_k$，$q_k$)，($p_k(t+\tau)$，$q_k(t+\tau)$)＝($P_k$，$Q_k$)と書く。

明らかに($p_k$，$q_k$)と($P_k$，$Q_k$)は同一の正準方程式(3)を満たすので、変換 S：($p_k$，$q_k$) → ($P_k$，$Q_k$)はシンプレクティック変換となり、(5)で H'＝H とした関係を満たす。それに(4)を適用した次式を、ここでは Hamilton-Jacobi 方程式[*)]と呼ぶ。

$$H\left(-\frac{\partial S(p_k,Q_k)}{\partial Q_j},Q_j\right)=H\left(p_j,-\frac{\partial S(p_k,Q_k)}{\partial p_j}\right) \tag{6}$$

(6)を、変換の母関数 S($p_k$，$Q_k$)に関する偏微分方程式とみなし、S($p_k$，$Q_k$)を決定できれば時間間隔 τ 刻みの厳密解が得られるが、一般には不可能である。そこで τ が微小な場合に注目する。S は次の形で近似できると考えられる [1)]。

$$\begin{cases} q_i=Q_i-\tau\dfrac{p_i}{m_i} \\ P_i=p_i-\tau\dfrac{\partial U(Q_k)}{\partial Q_i} \end{cases} \quad , \quad i=1,2,\cdots,n \tag{7}$$

(7)は母関数、

$$S(p_k,Q_k)=-\sum_j p_jQ_j+\tau\left(\sum_j\frac{p_j{}^2}{2m_j}+U(Q_k)\right) \tag{8}$$

から(4)を介して導けるので、シンプレクティック変換である。

(7)の形を一次の陽的シンプレクティック変換という [1)]。(6)に(7)を使えば、

$$H\left(p_j-\tau\frac{\partial U(Q_k)}{\partial Q_j},Q_j\right)=H\left(p_j,Q_j-\tau\frac{p_j}{m_j}\right) \tag{9}$$

であるが、(7)はあくまで近似なので一般に(9)は成立しない。

---

キーワード　シンプレクティク時間積分法，保存系，陽的解法，無条件安定
連絡先　〒060-0033 札幌市中央区北 3 条東 8 丁目 8-4
(株)砂子組 札幌本店 TEL011-232-8231

$$K = H(P_j, Q_j) - H(p_j, q_j) \tag{10}$$

$$K = -\frac{\tau}{2}\sum_j \frac{\tau}{2m_j}\frac{\partial U(Q_k)}{\partial Q_j}\frac{P_j}{m_j} - \frac{\tau}{2}\sum_j \frac{\tau}{2m_j}\frac{\partial U(Q_k)}{\partial Q_j}\frac{p_j}{m_j} + U(Q_k) - U(q_k) \tag{11}$$

$$K = -\frac{\tau}{2}\sum_j \frac{\partial U(Q_k)}{\partial Q_j}\frac{P_j}{m_j} + \frac{\tau}{2}\sum_j \frac{\partial U(q_k)}{\partial q_j}\frac{p_j}{m_j} + \sum_{2\le s}\sum_{j_1+j_2+\cdots j_n=s}\frac{(1-s/2)\tau^s}{j_1!\,j_2!\cdots j_n!}\frac{\partial^s U(q_k)}{\partial q_1^{j_1} q_2^{j_2}\cdots q_n^{j_n}}\frac{p_1^{j_1}p_2^{j_2}\cdots p_n^{j_n}}{m_1^{j_1}m_2^{j_2}\cdots m_n^{j_n}} \tag{12}$$

$$H(P_j, Q_j) + \frac{\tau}{2}\sum_j \frac{\partial U(Q_k)}{\partial Q_j}\frac{P_j}{m_j} - \tau^2 u(Q_k) = H(p_j, q_j) + \frac{\tau}{2}\sum_j \frac{\partial U(q_k)}{\partial q_j}\frac{p_j}{m_j} - \tau^2 u(q_k) \tag{13}$$

(10)でKを定義する。Hを保存系のハミルトニアンの形(2)を使って成分で書き下し、一次の陽的シンプレクティック法の関係式(7)を代入して整理すれば、(11)が得られる。$U(Q_k)$と$\partial U(Q_k)/\partial Q_i$を$q=(q_k)$のまわりでデーラー展開すれば、(12)となる。(12)の右辺3項目は、(14)と(15)の条件を満たす$U_1(q_k)$を$(q_k)$でテーラー展開したものと考える事ができ、$U_1(Q_k)-U_1(q_k)$ に等しい。ただし $U_1$ は T を時間として、$t \leqq T \leqq t+\tau$ の間で局所的に定義される。

$$U_1(q_k) = \frac{\partial U_1(q_k)}{\partial q_j} = 0 \quad , \quad i = 1 \sim n \tag{14}$$

$$\frac{\partial^s U_1(q_k)}{\partial q_1^{j_1} q_2^{j_2}\cdots q_n^{j_n}} = \left(1-\frac{s}{2}\right)\frac{\partial^s U(q_k)}{\partial q_1^{j_1} q_2^{j_2}\cdots q_n^{j_n}} \tag{15}$$

$$j_1 + j_2 + \cdots + j_n = s \quad , \quad 2 \le s$$

$U_1(q_k)$は(12)から、$\tau^2$以上の因数を含んでいるので、$\tau^2 \cdot u(q_k) = U_1(q_k)$によって$u(q_k)$を定義する。以上の結果をKの定義(10)に戻せば(13)が得られるが、これは、

$$J(p,q) = \sum_j \frac{{p_j}^2}{2m_j} + U(q_k) + \frac{\tau}{2}\sum_j \frac{\partial U(q_k)}{\partial q_j}\frac{p_j}{m_j} - \tau^2 u(q_k) \tag{16}$$

では Hamilton-Jacobi 方程式が成立する事を意味し、J(p, q)の厳密解を(7)を用いて、時間間隔τ刻みで得るこができる。

## 3. 近似系のエネルギー

(16)の正準方程式から、(16)の$p_j$は一般化運動量、

$$p_i = m_i \dot{q}_i - \frac{\tau}{2}\frac{\partial U(q_k)}{\partial q_i} \tag{17}$$

である。通常の運動量での表現を得るため、(17)とルジャンドル変換でラグラジアンに戻し、ラグラジュ方程式で$q_i(t)$の運動方程式を計算し、$p_i = m_i \cdot dq_i/dt$ としてエネルギーの表式H'を求めれば[2)]、次式である。

$$H'(p,q) = \sum_j \frac{{p_j}^2}{2m_j} + U(q_k) - \tau^2\left(\sum_j \frac{1}{8m_j}\left(\frac{\partial U(q_k)}{\partial q_j}\right)^2 + u(q_k)\right) \tag{18}$$

(18)の解は、(16)の解と(17)から得られ、無条件安定な数値解となる。次に(2)のHを元の系、(18)のH'を近似系と呼ぶ。HとH' には$\tau^2$オーダーの項の違いしかない。HとH'は保存系で定数であり、もとの系と近似系の解のエネルギー差は$\tau^2$オーダーにとどまる。従って近似系の数値的厳密解を、もとの系の数値的近似解として採用できる。

## 4. シンプレクティック法の計算手続きと利点

$Q_k$などを$q_k(t+\tau)$などに戻せば、次の計算手続きを得る。

$$\begin{cases} q_i(t+\tau) = q_i(t) + \tau\dfrac{p_i(t)}{m_i} \\ P_i(t+\tau) = p_i(t) - \tau\dfrac{\partial U(q_k(t+\tau))}{\partial q_i} \\ \left(m_i \dot{q}_i(t) = p_i(t) + \dfrac{\tau}{2}\dfrac{\partial U(q_k(t))}{\partial q_i}\right) \quad ※\ 必要に応じ. \end{cases} \tag{19}$$

シンプレクティック法の利点を以下に述べる。

1) 無条件安定な陰解法である。
2) 陰解法であるが計算手続きは陽的。陰解法特有の非線形ポテンシャルに関する繰り返し計算不要。
3) 時間積分ステップ幅τの2次精度が保証される。

(19)から明らかなように、実質の計算手順は一次オイラーと同じである。試算では同法は、陽解法である4次のルンゲ・クッタ法の4倍、陰解法であるニューマークβ法の6倍程度速かった。精度面では、β=1/4としたニューマークβ法（無条件安定，2次精度）と同等であった。

## 5. まとめ

シンプレクティック時間積分法は、高い実行速度と無条件安定な精度が保証され、保存系の範囲ではほぼ確立された運動方程式の数値積分法である[1)]。今回、時間推進演算子に依存しない形でそれらの特徴をより簡潔に示せたので、同様な方法で地震力などの時間依存外力を有する系にも、一次または2次の陽的シンプレクティック法を拡張する予定である。

［参考文献］


*) オリジナルの形ではない[2)].

1) 臨時別冊・数理科学，計算物理入門，サイエンス社，2001年9月.

2) 古典力学，ゴールドスタイン，吉岡書店，1978年5月.