保存系のシンプレクティック時間積分法に関する一考察

a Consideration on symplectic Time Integration Method for conservative System

(株)砂子組　○正　員　田尻太郎 (Taro Tajiri)
(株)砂子組　　正　員　幌村瑛奈 (Ena Horomura)
(株)砂子組　　正　員　加來孝志 (Takashi Kaku)

1. はじめに

ここではベクトルを、q＝(q_1，q_2，・・・，q_n)などで略記する。質点に働く力が変位 q 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、

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

は、保存系の一種である。

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、より定性的に示し、保存系以外への適用を容易にする定式化を検討した。

保存力はポテンシャル U(q)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、

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

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/dt，dp/dt)＝(∂H/∂p，－∂H/∂q)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、

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

となる。変換 T：(p，q) → (P，Q)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 T は母関数と呼ばれる、あるタイプの関数 S(p，Q)などから、

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

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 H'(P，Q)は、次の関係にある [2]。

$$H'(P,Q)=H(p,q) \tag{5}$$

2. 2 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(t)，q(t))とする。 (p(t), q(t))から時間間隔 τ 後の(p(t＋τ)，q(t＋τ))への変換 T を保存系で考える。以後、(p(t)，q(t))＝(p，q)，(p(t＋τ), q(t＋τ))＝(P，Q)と書く。

明らかに(p，q)と(P，Q)は同一の正準方程式(3)を満たすので、変換 T：(p，q) → (P，Q)はシンプレクティック変換であり、H'＝H とした(5)の関係を満たす。それに(4)を適用した次式を、ここでは Hamilton-Jacobi 方程式[*]と呼ぶ。

$$H\left(-\frac{\partial S(p,Q)}{\partial Q},Q\right)=H\left(p,-\frac{\partial S(p,Q)}{\partial p}\right) \tag{6}$$

(6)を、変換の母関数 S(p，Q)に関する偏微分方程式とみなし S(p，Q)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。

τ が微小な場合、変換 T は次の形で近似できると考えられる [1]。

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

(7)は、以下の 2 つの変換の合成である。

$$\begin{cases} q_i'=q_i+\dfrac{\tau}{2}\dfrac{p_i}{m_i} \\ p_i'=p_i-\dfrac{\tau}{2}\dfrac{\partial U(q_k')}{\partial q_i'} \end{cases} \tag{8}$$

$$\begin{cases} P_i=p_i'-\dfrac{\tau}{2}\dfrac{\partial U(q')}{\partial q_i'} \\ Q_i=q_i'+\dfrac{\tau}{2}\dfrac{P_i}{m_i} \end{cases} \tag{9}$$

(8)と(9)は、2 つのタイプの正準変換、

$$\begin{cases} q_i = -\dfrac{\partial S_1(p, q')}{\partial p_i} \\ p'_i = -\dfrac{\partial S_1(p, q')}{\partial q'_i} \end{cases} \tag{10}$$

$$\begin{cases} p'_i = \dfrac{\partial S_2(P, q')}{\partial q'_i} \\ Q_i = \dfrac{\partial S_2(P, q')}{\partial P_i} \end{cases} \tag{11}$$

に対して、母関数を、

$$S_1(p, q') = -\sum_j p_j q'_j + \tau\left(\sum_j \frac{{p_j}^2}{2m_j} + U(q')\right) \tag{12}$$

$$S_2(P, q') = \sum_i P_i q'_i + \tau\left(\sum_i \frac{{P_i}^2}{2m_i} + U(q')\right) \tag{13}$$

の形に選べば得られる。

2 つのシンプレクティック変換の合成はシンプレクティック変換である事が知られている [2]。(7)の形を 2 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、

$$H\left(p - \tau\frac{\partial U(q')}{\partial q'}, Q\right) = H\left(p, Q - \frac{\tau}{2}\left(\frac{P}{m} + \frac{p}{m}\right)\right) \tag{14}$$

であるが、(7)はあくまで近似なので、一般に(14)は成立しない。

(14)の左辺から右辺を引いた残差を、

$$R = H(P, Q) - H(p, q) \tag{15}$$

で定義する。

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、2 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、(16)が得られる。

$$\begin{aligned} R &= U(Q) - U(q') - \nabla U(q')\cdot(Q - q') \\ &\quad - \left(U(q) - U(q') - \nabla U(q')\cdot(q - q')\right) \end{aligned} \tag{16}$$

∇U(q')は U(q)の q'におけるの勾配を表し、･は内積。

ここで、

$$u_0(q) = U(q) - U(q') - \nabla U(q')\cdot(q - q') \tag{17}$$

とすれば $u_0(q)$は、q'から q への U(q)の増分から、q'における U(q)の接平面の増分を引いた形になっている。

すなわち、U(q)－U(q')の q'のまわりでのテーラー展開の 2 次以上の項の和となる。(7)の第 1 式に注意すれば、q－q'は τ/2 オーダーなので、$u_0(q)$は$(\tau/2)^2$ のオーダーになる。そこで、

$$\frac{\tau^2}{4}u(q) = u_0(q) \tag{18}$$

で u(q)を定義すれば、U(Q)についても同様であり R は、

$$R = \frac{\tau^2}{4}u(Q) - \frac{\tau^2}{4}u(q) \tag{19}$$

の形に書ける。

以上の結果を R の定義(15)に戻せば、(2)も考慮して、

$$\sum_j \frac{{P_j}^2}{2m_j} + U(Q) - \frac{\tau^2}{4}u(Q) = \sum_j \frac{{p_j}^2}{2m_j} + U(q) - \frac{\tau^2}{4}u(q) \tag{20}$$

が得られる。

(20)はシンプレクティック変換(7)に対して Hamilton-Jacobi 方程式(6)が成り立つ事を意味するので、右辺と同じ形を持つハミルトニアン H'(p，q)、

$$H'(p, q) = \sum_j \frac{{p_j}^2}{2m_j} + U(q) - \frac{\tau^2}{4}u(q) \tag{21}$$

については(7)が厳密に成り立つ事になり、時間間隔 τ 刻みの厳密解を得る事ができる。

従って 2 次の陽的シンプレクティック法は、無条件安定な数値解法である。

$u_0(q)$の具体的な形は、U(q')を q のまわりのテーラー級数で展開し直せば、

$$\begin{aligned} u_0(q) &= \\ &-\sum_{2\le s}\ \sum_{j_1+j_2+\cdots+j_n=s}\left((1-s)\frac{\partial^s U(q)}{\partial q_1^{j_1} q_2^{j_2}\cdots q_n^{j_n}}\right. \\ &\qquad\left.\frac{(q'_1 - q_1)^{j_1}(q'_2 - q_2)^{j_2}\cdots(q'_n - q_n)^{j_n}}{j_1!\,j_2!\cdots j_n!}\right) \end{aligned} \tag{22}$$

の形に書ける。ただし $\partial^s/\partial q_1^{\alpha}/\partial q_2^{\beta}/\cdots/\partial q_n^{\gamma}$ を、$\partial^s/q_1^{\alpha}/q_2^{\beta}/\cdots/q_n^{\gamma}$ で略記した。

ポテンシャル U(q)が剛性マトリックス K＝(K_{ij})で、

$$U(q) = \frac{1}{2}\sum_{i,j} K_{ij} q_i q_j \tag{23}$$

のように与えられる場合には(22)は、

$$u_0(q) = -\frac{1}{2}\sum_i K_{ii}(q'_i - q_i)^2 \tag{24}$$

となり、変換式(7)の第 1 式から q'－q＝(τ/2)v なので、

$$u_0(q) = -\frac{\tau^2}{8}\sum_i K_{ii}{v_i}^2 \tag{25}$$

である。ここに v＝(v_i)は、q(t)における速度 v(t)。

*) オリジナルの形ではない [2].

3．陽的シンプレクティック法の利点

(7)による数値的時間積分の計算手順は、時間刻みを

τ/2 とした 1 次のオイラー法を 2 段重ねたものと実質的に同じである。陽解法と同程度の実行速度を期待できる。

しかし変換式の両辺に、t，t＋τ/2，t＋τ 時点の項が入り混じっているので、シンプレクティック法は陰解法である。

次に、ハミルトニアン(2)で表される保存系をもとの系、ハミルトニアン(21)で表される保存系を近似系と呼ぶ事にする。

保存系においてハミルトニアンは系のエネルギーを表し、それは初期条件で決定される、時間に対する定数だった。

(2)と(21)を比べると、差は微小とした τ^2 のオーダーの違いしかなく、2 次の陽的シンプレクティック法は(21)の厳密解を与えた。

従って、近似系の数値的厳密解を、時間に対して 2 次のエネルギー精度を持つ、もとの系の数値的近似解として採用できる事になる。

陽的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が不要。
3) 従って実行速度が速い。
4) 2 次解法では、時間積分ステップ幅 τ の 2 次精度の解が保証される。

4. 1 次の陽的シンプレクティック法

陽解法である 1 次のオイラー法と計算手順がよく似た、1 次精度のシンプレクティック法も可能である。次式を 1 次の陽的シンプレクティック法と呼ぶ。

$$\begin{cases} q_i = Q_i - \tau \dfrac{p_i}{m_i} \\ P_i = p_i - \tau \dfrac{\partial U(Q)}{\partial Q_i} \end{cases} \tag{26}$$

(26)は(10)のタイプの正準変換に対して、(12)の形の母関数を選べば得られる。

2 次の場合と同様な計算を行えば、次のハミルトニアン J(p，q)の厳密解を与える事がわかる。

$$J(p,q) = \sum_i \frac{p_i^{\,2}}{2m_i} + U(q) + \frac{\tau}{2}\sum_i \frac{\partial U(q)}{\partial q_i}\frac{p_i}{m_i} - \tau^2 u(q) \tag{27}$$

しかし(27)の正準方程式は、

$$\begin{cases} \dot{q}_i = \dfrac{p_i}{m_i} + \dfrac{\tau}{2m_i}\dfrac{\partial U(q)}{\partial q_i} \\ \dot{p}_i = -\dfrac{\partial U(q)}{\partial q_i} - \dfrac{\tau}{2}\sum_j \dfrac{\partial^2 U(q)}{\partial q_i \partial q_j}\dfrac{p_j}{m_j} + \tau^2 \dfrac{\partial u(q)}{\partial q_i} \end{cases} \tag{28}$$

となり、その第 1 式から運動量 p が、

$$p_i = m_i \dot{q}_i - \frac{\tau}{2}\frac{\partial U(q)}{\partial q_i} \tag{29}$$

になる事がわかる。これは一般化運動量 [2)]である。

通常の運動量 $m_i \cdot dq_i/dt$ での表現を得るために、一般化運動量の定義(29)を用いたルジャンドル変換 [2)]を行い、さらにラグランジュ方程式 [2)]から運動方程式を計算すると、

$$m_i \ddot{q}_i + \frac{\partial U(q)}{\partial q_i} - \tau^2 \left(\sum_j \frac{1}{8m_j}\frac{\partial}{\partial q_i}\left(\frac{\partial U(q)}{\partial q_j}\right)^2 + \frac{\partial u(q)}{\partial q_i} \right) = 0 \tag{30}$$

が得られる。

運動方程式(30)に対応するハミルトニアンが、

$$H'(p,q) = \sum_j \frac{p_j^{\,2}}{2m_j} + U(q) - \tau^2\left(\sum_j \frac{1}{8m_j}\left(\frac{\partial U(q)}{\partial q_j}\right)^2 + u(q) \right) \tag{31}$$

になるのは明らかであり、これを近似系のハミルトニアンとして採用できる。ただし $u_0(q)=\tau^2 u(q)$。

$u_0(q)$の具体的な形は、

$$u_0(q) = -\frac{1}{2}\sum_{2\le s}\sum_{j_1+j_2+\cdots+j_n=s}\left(\frac{\partial^s U(q)}{\partial q_1^{j_1} q_2^{j_2}\cdots q_n^{j_n}} \frac{(Q_1-q_1)^{j_1}(Q_2-q_2)^{j_2}\cdots(Q_n-q_n)^{j_n}}{j_1!\,j_2!\cdots j_n!} \right) \tag{32}$$

ポテンシャル U(q)が剛性マトリックスで与えられる場合は、

$$u_0(q) = -\frac{\tau^2}{2}\sum_i K_{ii} v_i^{\,2} \tag{33}$$

となる。

1 次解法では、変換(26)で(27)のハミルトニアン J(p，q)の厳密解を計算した後、一般化運動量の定義(29)から通常の運動量に、

$$m_i \dot{q}_i = p_i + \frac{\tau}{m_i}\frac{\partial U(q)}{\partial q_i} \tag{34}$$

で変換すれば、(31)のハミルトニアン H'(p，q)を満たす 2 次精度の解が得られる。

そうしない場合は(27)の 1 次精度である。

5. 適用可能な応用例と考察

保存系の数値的近似解がシンプレクティック法で計算

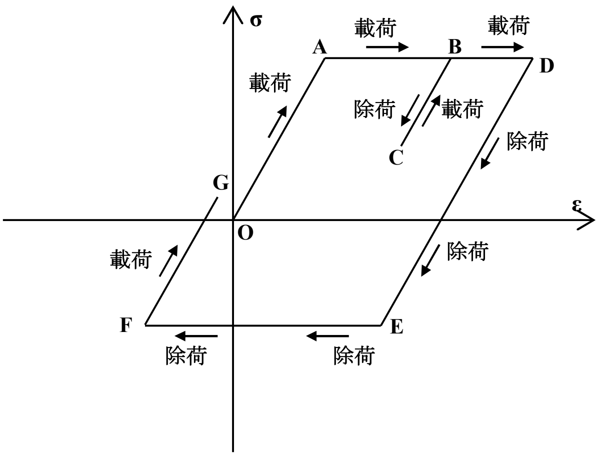

図-1 バイリニアな応力－歪み関係の模式図

可能である事はほぼ確立されている。

弾塑性解析では応力－歪み関係として、図-1 のようにバイリニアやトリリニアな形が仮定される事が多い。

有限要素法解析を念頭におけば、応力－歪み関係は適当な剛性マトリックスと変位ベクトル q から定義できるので保存力であり、対応するポテンシャル関数を次式のように想定できる。

$$U(q) = U_0 + \frac{1}{2}(q - q_0)^t K^{(p)} (q - q_0) \quad (35)$$

ただし応力－歪み関係の時刻歴挙動を考慮すると、履歴減衰が生じ、通常の保存系とは言い難い。

実際(35)の U_0 は、各時刻における履歴減衰による損失エネルギー，q_0 はその時点での残留歪みを表す変位ベクトル，$K^{(p)}$ は塑性化した要素を考慮した、初期状態から更新された剛性マトリックスであり、^{t} は転置を表す。

例えば図-1 では載荷経路 O→A→B までは一つのポテンシャル U_{OAB} と考えられるが、B 点で除荷が起こると経路 B→C→B→D で別のポテンシャル U_{BCBD} に切り変わったと考える必要がある。何故なら、B での除荷も U_{OAB} で表せるならば、B 近傍の除荷経路は B→A とならなければならないからである。

けっきょく図-1 では、U_{OAB}，$U_{BCB'}$，U_{BCBD}，U_{DEF}，U_{FG} の 4 つのポテンシャルを想定する必要がある。4 つのポテンシャルが切り変わる時間は未知である。

しかしながら力学系において、任意の時刻に、任意に力を切り変える操作は許されるはずである。このように時間に対して区分的なポテンシャルとなる場合でも、(35)に示すように、ポテンシャル関数は変位 q によって決定されるので、時間的に局所的に見れば保存系であると考えられる。

従って無減衰な弾塑性解析にシンプレクティック法は適用できるはずである。

また無減衰な系で衝撃載荷を理想化し撃力とみなせば、載荷の瞬間に速度だけが不連続に変化し、それ以後は、載荷の瞬間に変化した速度を初期条件とする保存系とみなせる。

以上より、撃力を受ける無減衰な弾塑性衝撃応答解析を行えば、シンプレクティック法の有用性を確認できると考えられる。

6. 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。

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定性的に、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。

また、撃力を受ける無減衰な弾塑性衝撃応答解析も行う予定である。

［参考文献］

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．