

保存系における 2 次の陽的シンプレクティック時間積分法の定式化

(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

1. はじめに

作用力が変位のみに依存する質点系を保存系と呼び、運動方程式は一般に(1)となって力学的エネルギー保存則が成り立つ。x は質点系の変位ベクトル、M は質量マトリックス、K(x)はポテンシャルUから導かれる保存力、iは自由度番号、 $\dot{\cdot}$ は時間微分を表す。通常 M は正定値対称なので適当な直交変換 S と対角行列 D とで(2)の形に分解できる。¹⁾ T は転置、 $m_i > 0$ 、N は自由度数。q=Sx で変換すれば(1)は(3)に帰着する。(3)のエネルギー表式は(4)となり、ハミルトニアンと呼んで H(p, q)で表す。 m_i と p_i は、i 番目の質点の質量と運動量。以降は(3)、(4)の形を前提とする。シンプレクティック法の高い実行速度と無条件安定な精度保証は通常、保存系の範囲での時間推進展開による定式化¹⁾となるが、同展開は保存系に特化し他の系への拡張の見通しが悪いため、拡張性を考慮した別の定式化を検討した。ハミルトン-ヤコビ方程式（オリジナルの形ではない²⁾）を利用した既出の結果³⁾では 1 次解法を扱い、同法の特徴を同範囲でより簡潔に定性的に示せたが、エネルギー誤差を級数で与えた点で見通しが悪く、一般化運動量を用いた定式化にもなり、通常の運動量に戻す後処理が必要となった。ここでは 2 次解法に対して同じ定式化を行い、エネルギー誤差のより簡潔な表式を与え、2 次解法では通常の運動量の使用が可能な事を示す。

2. 2 次の陽的シンプレクティック法

運動量と変位(p, q) (2N 次元) を新しい運動量と変位(P, Q)に変換しても正準形式²⁾を変えない時、シンプレクティック変換と呼ばれ、これの十分条件は(p, q)と(P, Q)が同じ運動方程式を満たせば良い。特に時刻 t で(p, q)=(p(t), q(t))、時間間隔 τ 後で(P, Q)=(p(t+ τ), q(t+ τ))とすると、(p, q)→(P, Q)はシンプレクティック変換になる。変換前後のハミルトニアン²⁾の関係は(5)である²⁾。同変換は変換の母関数 $S_1(p, Q)$ などから(6)などによって定義される²⁾。(6)を(5)に代入した関係式、 $H(-\partial S_1/\partial Q, Q)-H(p, -\partial S_1/\partial p)=0$ を、ここではハミルトン-ヤコビ方程式と呼ぶ³⁾。これが母関数 $S_1(p, Q)$

$$M \ddot{x} + K(x) = 0, \quad K_i(x) = \frac{\partial U(x)}{\partial x_i} \quad (1)$$

$$M = S^T D(m_1, m_2, \dots, m_N) S \quad (2)$$

$$m_i \ddot{q}_i + \frac{\partial U(q)}{\partial q_i} = 0, \quad \frac{\partial U(q)}{\partial q_i} = (SK(S^T q))_i \quad (3)$$

$$H(p, q) = \sum_i \frac{p_i^2}{2m_i} + U(q) \quad (4)$$

$$H(P, Q) = H(p, q) \quad (5)$$

$$q_i = -\frac{\partial S_1(p, Q)}{\partial p_i}, \quad P_i = -\frac{\partial S_1(p, Q)}{\partial Q_i} \quad (6)$$

$$p_i = \frac{\partial S_2(P, q)}{\partial q_i}, \quad Q_i = \frac{\partial S_2(P, q)}{\partial P_i} \quad (7)$$

$$\begin{cases} q'_i = q_i + \frac{\tau}{2} \frac{p_i}{m_i} \\ P_i = p_i - \tau \frac{\partial U(q')}{\partial q'_i} \\ Q_i = q'_i + \frac{\tau}{2} \frac{P_i}{m_i} \end{cases}, \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (8)$$

$$S_1(p, q') = -\sum_j p_j q'_j + \frac{\tau}{2} \left(\sum_j \frac{p_j^2}{2m_j} + U(q') \right) \quad (9)$$

$$S_2(P, q') = \sum_i P_i q'_i + \frac{\tau}{2} \left(\sum_i \frac{P_i^2}{2m_i} + U(q') \right) \quad (10)$$

$$R = H(P, Q) - H(p, q) \quad (11)$$

$$R = U(Q) - U(q') - \nabla U(q') \cdot (Q - q') - (U(q) - U(q') - \nabla U(q') \cdot (q - q')) \quad (12)$$

$$u_0(q) = U(q) - U(q') - \nabla U(q') \cdot (q - q') \quad (13)$$

$$\sum_i \frac{P_i^2}{2m_i} + U(Q) - \frac{\tau^2}{4} u(Q) = \sum_i \frac{p_i^2}{2m_i} + U(q) - \frac{\tau^2}{4} u(q) \quad (14)$$

キーワード シンプレクティック時間積分法、無条件安定、近似エネルギー保存、陽的解法

連絡先 〒060-0033 札幌市中央区北 3 条東 8 丁目 8 番地 4 砂子ビル 6F

(株) 砂子組札幌本店 TEL011-232-8231

の偏微分方程式として具体的に解ければ(6)を通じて時間刻み τ の厳密解が得られるが、一般には解けない。しかし τ が微小な場合には、2 次の陽的シンプレクティック変換(8)で近似できる。(8)は(6)と(7)に、 $(P, Q)=(p', q')$ 、 $(p, q)=(p', q')$ として母関数(9)と(10)を与えて得られる2つのシンプレクティック変換の合成で、シンプレクティック変換の合成はシンプレクティックである。(8)を(5)に代入しても近似なので成立しないが、具体的に計算できる。その場合の残差 R を(11)で定義する。(11)右辺に(4)を考慮して成分で書き下し、変換(8)を代入して整理すれば(12)が得られる。 ∇ は勾配、 $\cdot$ は内積である。ここで(12)下段を $u_0(q)$ として取り出せば((13))、 $u_0(q)$ は q' を中心とする $U(q)$ のテーラー展開の2次以上の項の和に等しい。展開半径は変換(8)の第1式より $\tau/2$ オーダーで、全体として $(\tau/2)^2$ オーダーになる。 $u_0(Q)$ も同様に定義でき、 $(\tau/2)^2$ を明示する形で $(\tau/2)^2 u(q) = u_0(q)$ として、結果を残差 R の定義(11)に戻せば(14)が得られる。ただし(4)を考慮した。

よって変換(8)は(14)の形のハミルトン-ヤコビ方程式を満たし、その右辺と同じ形のハミルトニアン $H'(p, q)$ の厳密解を与える((15))。(15)に対応する運動方程式は明らかに(16)であり、2次の陽的シンプレクティック法(8)は、対応する運動方程式が存在するという意味において無条件安定な数値解法になる。

なお $U(q)$ が剛性マトリックス $K=(K_{ij})$ によって $U(q)=q^T K q/2$ で与えられる線形系なら、 $u_0(q)$ は(17)の形に書ける。 $v=(v_i)$ は時刻 t の時点の速度。

3. 近似エネルギーの保存性と実行性

以下、ハミルトニアン H をもとの系、 H' を近似系と呼ぶ。

$$(\text{もとの系}) : H = \sum_i \frac{p_i^2}{2m_i} + U(q) = C$$

$$(\text{近似系}) : H' = \sum_i \frac{p_i^2}{2m_i} + U(q) - \frac{\tau^2}{4} u(q) = C'$$

保存系でハミルトニアンは、系の力学的エネルギーを表す。上記において C, C' は、初期条件で決まる時間の定数である。従ってもとの系と近似系の解のエネルギー差は常に、微小と仮定した τ^2 オーダーにとどまり、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。

(8)に示した実行手順は陽的であり、陽解法と同様な実行性を期待できる。 U が非線形ポテンシャルなら陰解法との計算時間の差は大きいと考えられるが、無条件安定な近似エネルギーの保存性により、通常の陽解法のように解は発散しない。

4. 弾塑性棒要素による実行速度例

バイリニアな応力-歪み関係を仮定した定歪み棒要素×

$$H'(p, q) = \sum_i \frac{p_i^2}{2m_i} + U(q) - \frac{\tau^2}{4} u(q) \quad (15)$$

$$m_i \ddot{q}_i + \frac{\partial U(q)}{\partial q_i} - \frac{\tau^2}{4} \frac{\partial u(q)}{\partial q_i} = 0 \quad (16)$$

$$u_0(q) = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} K_{ij} (q_i - q'_i)(q_j - q'_j) = -\frac{\tau^2}{8} \sum_{i,j} K_{ij} v_i v_j \quad (17)$$

表-1 バイリニア定歪み棒要素×100での実行速度例

	解法 次数	実行時間 (ms)	Step数	Step当り 平均(ms)
4次のルンゲ・クッタ法	4次	4638	101936	0.045
ニューマークβ法(β=1/4)	2次	22842	102110	0.224
陽的シンプレクティック法	2次	1708	101936	0.017

※ 長さ 10 m の鋼材柱を 100 分割。鋼種：SS400 級。
ステップサイズ τ ：要素固有周期の 1/100、約 1/5000 ms。
3 解法の結果は、ほぼ一致。

100 を用いた単純なモデルで、実行速度を試算した。表-1 は 100 要素の約 3 割が塑性化（非線形化）した結果となる。

5. まとめ

系が地震力のような時間依存外力を持つ場合、運動方程式とハミルトニアンは以下となり、ハミルトニアンは時間 t を陽に含む²⁾。

$$m_i \ddot{q}_i + \frac{\partial U(q)}{\partial q_i} = f_i(t)$$

$$H(p, q, t) = \sum_i \frac{p_i^2}{2m_i} + U(q) - \sum_i q_i f_i(t)$$

この場合、(8)に相当するシンプレクティック変換も時間 t を陽に含むようになり、変換前後の関係は変換の母関数を S として、

$$H(P, Q, t) = H(p, q, t) + \frac{\partial S}{\partial t}$$

となる²⁾。上記関係を利用し時間依存外力を有する場合も、シンプレクティック解法の無条件安定性を示す事は可能と考えられるが、力学的エネルギーはもはや保存しないので、エネルギーの近似性について別途評価が必要と考えられる。

【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。
- 3) 保存系のシンプレクティック時間積分法に関する考察，田尻他，土木学会全国大会第 80 回年次学術講演会，I-81，2025 年。