岡山理科大学紀要 第44号 A pp. 45-53(2008)

あるハミルトン系の長時間シミュレーションにおける誤差伝播についての数値実験

古松　和治・榊原　道夫*

岡山理科大学大学院総合情報研究科修士課程情報科学専攻
*岡山理科大学大学院総合情報研究科

（2008年９月30日受付、2008年11月７日受理）

１．はじめに

ハミルトン系は，R^{2d} 値関数 $x(t)=[q(t)^T, p(t)^T]$ $(q(t), p(t)\in R^d)$ を未知変数とする方程式で考えるとき，R^{2d} 上で定義された C^2 級関数 $H(q,p)$ を用いて，

$$\frac{dq_i}{dt}=\frac{\partial H}{\partial p_i},\quad \frac{dp_i}{dt}=-\frac{\partial H}{\partial q_i}\quad (i=1,2,\ldots,d) \tag{1.1}$$

と表される．関数 $H(q,p)$ はハミルトニアンである．本報告では，このハミルトン系の数値解法としてシンプレクティック・オイラー法，シュテルマー・ベルレの方法，ルースの方法，サンセルナの方法，CollatzとNyströmの４次と５次のルンゲ・クッタ法を用いる．これを単振動の問題

$$\frac{dq}{dt}=p\qquad \frac{dp}{dt}=-\pi^2 q\qquad H(q,p)=\frac{1}{2}(p^2+\pi^2 q^2) \tag{1.2}$$

に適用し，数値解のエネルギー保存，位相のずれについて調べる．

２．計算に用いた解法について

２－１　シンプレクティック・オイラー法とシュテルマー・ベルレの方法

シンプレクティック・オイラー法とシュテルマー・ベルレの方法の式は，

シンプレクティック・オイラー法

$$\begin{cases} q_{n+1}=q_n+hp_n \\ p_{n+1}=p_n-h\pi^2 q_{n+1} \end{cases} \tag{2.1}$$

シュテルマー・ベルレの方法

$$\begin{cases} p_{n+\frac{1}{2}}=p_n-\frac{h}{2}\pi^2 q_n \\ q_{n+1}=q_n+hp_{n+\frac{1}{2}} \\ p_{n+1}=p_{n+\frac{1}{2}}-\frac{h}{2}\pi^2 q_{n+1} \end{cases} \tag{2.2}$$

となる．

２－２　ルースの方法とサンセルナの方法

ルースの方法とサンセルナの方法はシンプレクティック・オイラー法やシュテルマー・ベルレの方法のより高次の公式である．ルースの方法は３次，サンセルナの方法は４次の式である．その式は，

ルースの方法

$$(2.3)\quad \begin{cases} u = q_n + \dfrac{7}{24}hp_n \\ v = p_n - \dfrac{2}{3}h\pi^2 u \\ u = u + \dfrac{3}{4}hv \\ v = v + \dfrac{2}{3}h\pi^2 u \\ q_{n+1} = u - \dfrac{1}{24}hv \\ p_{n+1} = v - h\pi^2 q_{n+1} \end{cases}$$

サンセルナの方法

$$(2.4)\quad \begin{cases} u = q_n + \dfrac{7}{48}hp_n \\ v = p_n - \dfrac{1}{3}h\pi^2 u \\ u = u + \dfrac{3}{8}hv \\ v = v + \dfrac{1}{3}h\pi^2 u \\ u = u - \dfrac{1}{48}hv \\ v = v - h\pi^2 u \\ u = u - \dfrac{1}{48}hv \\ v = v + \dfrac{1}{3}h\pi^2 u \\ u = u + \dfrac{3}{8}hv \\ v = v - \dfrac{1}{3}h\pi^2 u \\ q_{n+1} = u + \dfrac{7}{48}hv \\ p_{n+1} = v \end{cases}$$

となる.

2－3 NyströmとCollatzのルンゲ・クッタ法

NyströmとCollatzのルンゲ・クッタ法は２階微分方程式の初期値問題：

$$(2.5)\quad \frac{d^2y}{dt^2} = f(y), \qquad y(0) = \alpha, y'(0) = \beta$$

に対するルンゲ・クッタ法として用いられる．NyströmとCollatzのルンゲ・クッタ法の一般式は,

Nyström

$$(2.6)\quad \begin{aligned} k_i &= f(x_n + c_i h, y_n + c_i h y'_n + h^2 \sum_j \bar{a}_{ij} k_j \\ y_{n+1} &= y_n + h y'_n + h^2 \sum_i \bar{b}_i k_i \\ y'_{n+1} &= y'_n + h \sum_i b_i k_i \end{aligned}$$

Collatz

$$(2.7)\quad \begin{aligned} k_i &= h^2 f\left(x_n + c_i h, y_n + c_i h y'_n + \sum_j a_{ij} k_j \right) \\ y_{n+1} &= y_n + h y'_n + \sum_i b_i k_i \\ h y'_{n+1} &= h y'_n + \sum_i b'_i k_i \end{aligned}$$

となる．また，４次と５次のNyströmとCollatzのルンゲ・クッタ法をテーブル表記すると表１，表２，表３，表４のようになる[1)2)3)].

表１．Nyström, order 4

	c_i	$\bar{a}_{ij}$		
	0			
	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{8}$		
	1	0	$\frac{1}{2}$	
$\bar{b}_i$		$\frac{1}{6}$	$\frac{1}{3}$	0
b_i		$\frac{1}{6}$	$\frac{4}{6}$	$\frac{1}{6}$

表２．Collatz, order 4

	c_i	a_{ij}		
	0			
	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{8}$		
	1	0	$\frac{1}{2}$	
b'_i		$\frac{1}{6}$	$\frac{2}{6}$	
b_i		$\frac{1}{6}$	$\frac{4}{6}$	$\frac{1}{6}$

表３．Nyström, order 5

	c_i	$\bar{a}_{ij}$			
	0				
	$\frac{1}{5}$	$\frac{1}{50}$			
	$\frac{2}{3}$	$-\frac{1}{27}$	$\frac{7}{27}$		
	1	$\frac{3}{10}$	$-\frac{2}{35}$	$\frac{9}{35}$	
$\bar{b}_i$		$\frac{14}{336}$	$\frac{100}{336}$	$\frac{54}{336}$	0
b_i		$\frac{14}{336}$	$\frac{125}{336}$	$\frac{162}{336}$	$\frac{35}{336}$

表４．Collatz, order 5

	c_i	a_{ij}			
	0	0			
	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{32}$			
	$\frac{7}{10}$	$-\frac{7}{1000}$	$\frac{63}{250}$		
	1	$\frac{2}{7}$	0	$\frac{3}{14}$	
b'_i		$\frac{1}{14}$	$\frac{8}{27}$	$\frac{25}{189}$	
b_i		$\frac{1}{14}$	$\frac{32}{81}$	$\frac{250}{567}$	$\frac{5}{54}$

３．数値解

初期値を$q_0=0$，$p_0=\pi$，ステップ幅は$h=0.05$とし，各数値解法に適用し数値解を比較する．また，数値実験は数式処理ソフトウェアであるMapleを用い，精度は１２桁で行う．

３－１　シンプレクティック・オイラー法とシュテルマー・ベルレの方法

双方のある地点での数値解を表５に示した．また$t=970$付近のグラフを図１，図２に示した．$t=485$のときにフェーズが4分の1ずれ，$t=970$のときに完全に反転していることが表５とグラフからわかる．

表５．シンプレクティック・オイラー法とシュテルマー・ベルレの方法の
$t=$ 0, 485, 970での数値解と解析解との比較

t	解析解	シンプレクティック・オイラー法	シュテルマー・ベルレの方法
0	0	0	0
485	0	1.003098593540	1.003098593510
970	0	0.000061932703	0.000061932786

$t=n*h$

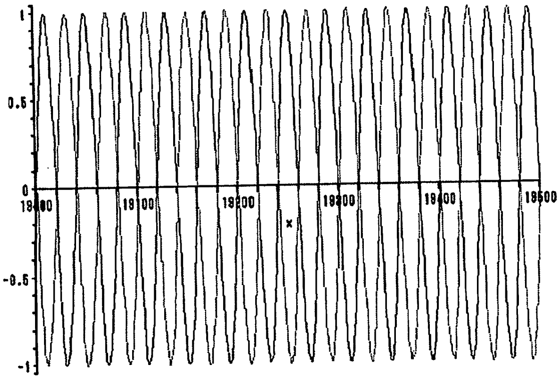

図１．シンプレクティック・オイラー法
（$t=950\sim975$）

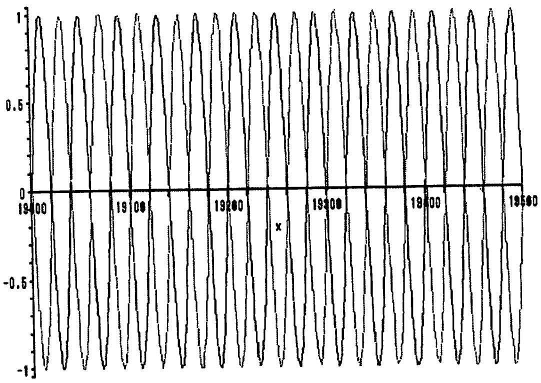

図２．シュテルマー・ベルレの方法
（$t=950\sim975$）

３－２　ルースの方法とサンセルナの方法

双方の数値解を$t=10000$まで計算した．その数値解を表６に示す．どちらもシンプレクティック・オイラー法などのような大きなフェーズのずれは$t=10000$まででは見られなかった．

表６．ルースの方法とサンセルナの方法の数値解

t	ルースの方法	サンセルナの方法
0	0	0
1000	0.00122371662337	0.00007647569480
9000	0.01101323109080	0.00068828343260
10000	0.01223686561660	0.00076475951310

$t=n*h$

３－３　NyströmとCollatzのルンゲ・クッタ法

NyströmとCollatzの４次と５次のルンゲ・クッタ法を例題に適用し，それぞれ数値解を比較した．その数値解をそれぞれ表７，表８に示した．NyströmとCollatz４次のルンゲ・クッタ法は式には違いがあるがかかる重みは変わらず，それぞれの数値解は小数点以下８桁まで同じ値を示した．NyströmとCollatzの５次のルンゲ・クッタ法は，４次の式とは違いそれぞれにかかる重みに違いがある．$t=10000$の時，どちらも４次の誤差は約5.92×10^{-2}であるのに対し，５次の誤差はそれぞれ約7.02×10^{-5}，5.79×10^{-5}となり，より精度の高い値を得ることができた．また，この問題ではCollatzの５次の方が精度はよい．

表７．Nyström, order 4 & Collatz, order 4の数値解

t	Nystrom-4	Collatz-4
0	0	0
1000	0.00595621610813	0.00595621638473
9000	0.05335745749010	0.05335745690690
10000	0.05924848414760	0.05924848366730

$t=n*h$

表８．Nyström, order 5 & Collatz, order 5の数値解

t	Nystrom-5	Collatz-5
0	0	0
1000	0.00000701877693	0.000005791121751
9000	0.00006321254689	0.000052150649420
10000	0.00007024196392	0.000057949040370

$t=n*h$

4．ハミルトニアンの比較

4－1　シンプレクティック・オイラー法とシュテルマー・ベルレの方法のハミルトニアンの比較

シンプレクティック・オイラー法とシュテルマー・ベルレの方法のハミルトニアンについて調べ，$t=1000$ までの値を表９に示した．また，そのグラフを図３，図４に示した．シンプレクティック・オイラー法とシュテルマー・ベルレの方法のどちらもハミルトニアンのグラフは振動しており，ハミルトニアンの振動はシュテルマー・ベルレの方法の方が緩やかであった．

表９．シンプレクティック・オイラー法とシュテルマー・ベルレの方法のハミルトニアン

t	シンプレクティック・オイラー法	シュテルマー・ベルレの方法
0	4.93480220054	4.93480220054
500	5.03365616377	4.96535915062
1000	4.86025580064	4.93509082588

$t=n*h$

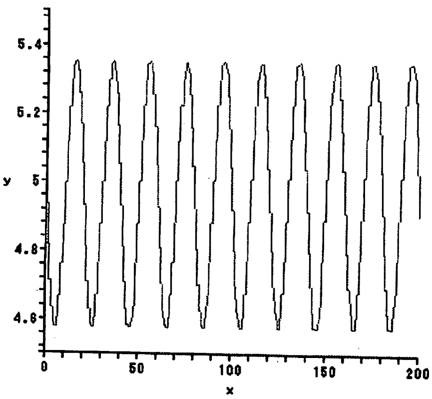

図３．シンプレクティック・オイラー法

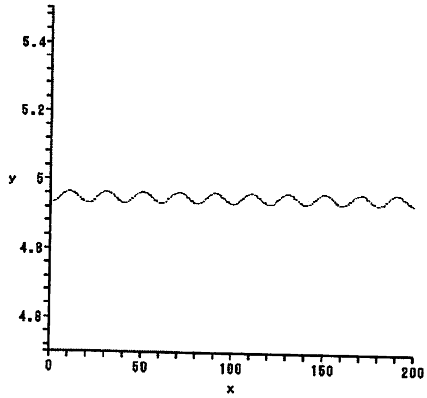

図４．シュテルマー・ベルレの方法

4－2　ルースの方法とサンセルナの方法のハミルトニアンの比較

ルースの方法とサンセルナの方法のハミルトニアンについて調べ，$t=10000$ までの値を表１０に示した．また，ルースの方法とサンセルナの方法のグラフをそれぞれ図５，図６に示した．どちらもシンプレクティック・オイラー法やシュテルマー・ベルレの方法のようにハミルトニアンは大きな振動をしていないが，ルースの方法はハミルトニアンが4.935の付近を小さな幅で振動している．サンセルナの方法はほぼ一定の値を示した．

表１０．ルースの方法とサンセルナの方法のハミルトニアン

t	ルースの方法	サンセルナの方法
0	4.93480220054	4.93480220054
1000	4.93480350028	4.93480219500
9000	4.93481392069	4.93480220192
10000	4.93481522348	4.93480220504

$t=n*h$

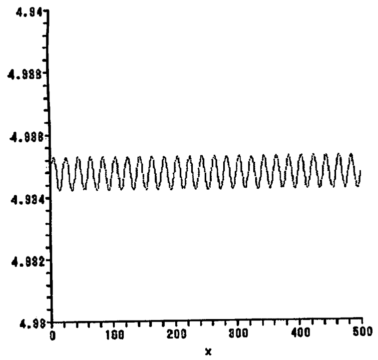

図５．ルースの方法（$t=0$～25）

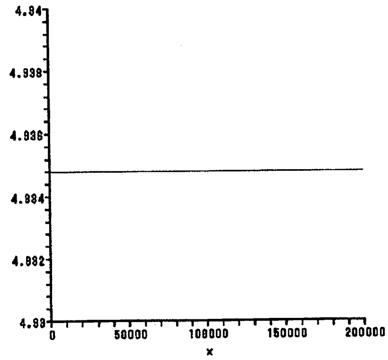

図６．サンセルナの方法（$t=0$～25）

４－３　NyströmとCollatzの４次のルンゲ・クッタ法のハミルトニアンの比較

NyströmとCollatzの４次のルンゲ・クッタ法のハミルトニアンについて比較した．

表１１．Nyström, order 4のハミルトニアン

t	数値解
0	4.93480220054
1000	4.92965702136
9000	4.88868820312
10000	4.88359108937

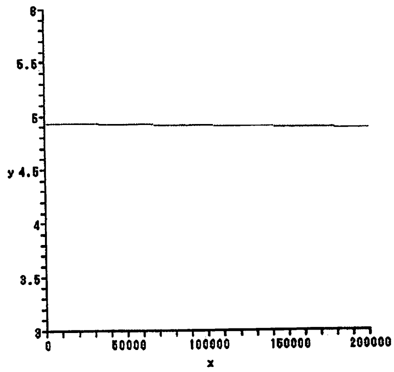

図７．Nyström, order 4のハミルトニアンのグラフ

表１２．Collatz, order 4のハミルトニアン

t	数値解
0	4.93480220054
1000	4.92965702141
9000	4.88868821309
10000	4.88359109761

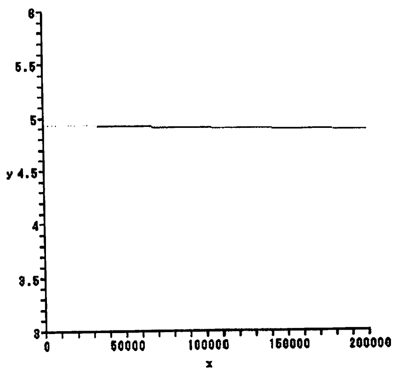

図８．Collatz, order 4のハミルトニアンのグラフ

ハミルトニアンも数値解のときと同様にほとんど差のない値が得られた．厳密解では一定であるハミルトニアンだが，Nyströmの４次とCollatzの４次の両方とも$t=10000$まで計算すると，図７，図８のようにグラフで少々の傾きが目に見えた．

4－4　NyströmとCollatzの５次のルンゲ・クッタ法のハミルトニアンの比較

NyströmとCollatzの５次の時のハミルトニアンについて比較した.

表１３. Nyström, order 5のハミルトニアン

t	数値解
0	4. 93480220054
1000	4. 93562338525
9000	4. 94219777746
10000	4. 94302019491

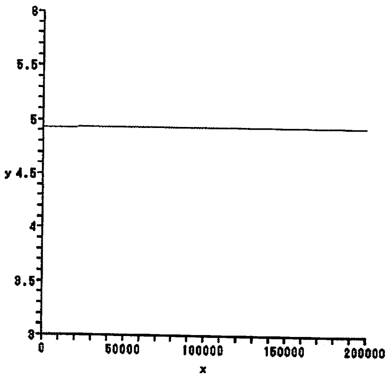

図９. Nyström, order 5のハミルトニアンのグラフ

表１４. Collatz, order 5のハミルトニアン

t	数値解
0	4. 93480220054
1000	4. 93552105801
9000	4. 94127559026
10000	4. 94199537559

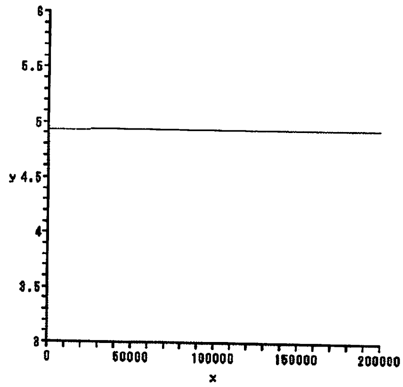

図１０. Collatz, order 5のハミルトニアンのグラフ

NyströmとCollatzの５次のときのハミルトニアンは，一定である厳密解のハミルトニアンに対し，増加していることがわかった. しかし５次の場合，その誤差も僅かであり双方とも精度のよい値を得ることができた.

５. 考察

単振動問題に対して各種の方法で計算を行い，その振る舞いについて比較検討した. シンプレクティック法は，ハミルトニアンの値は有界な振動で変動し，誤差の振幅は時間ステップを小さくするほど小さくなる. しかし，時間が進むにつれ，位相のずれが大きくなる. シンプレクティック・オイラー法とシュテルマー・ベルレの方法はそれぞれ１次および２次精度であるため，ハミルトニアンの誤差の増大の変わりに誤差の蓄積が位相のズレに出ていると考えられる. 比較的長い時間の計算においてもそれらの数値解は厳密解とそれほど違わず，ハミルトニアンおよび位相ともに誤差の成長が緩慢である. ルースの方法とサンセルナの方法はそれぞれ３次および４次精度のため誤差は小さくなる. 特にサンセルナの方法はハミルトニアンに含まれる誤差が非常に小さいことがわかった. ハミルトン系は物理的な背景より導出されているため，位相のズレはシミュレーションの結果に深刻な誤解を生む場合が考えられる. 一方，ここで取り上げたNyströmとCollatzの方法は２階の微分方程式に対するものである. 位相のずれに対してはNyströmとCollatzの方法の方が精度がよい. また，NyströmとCollatzの方法は位相についてはよい精度を示すが，シンプレクティックではないために，ハミルトニアンは時間の経過とともに増加の傾向にある. これらのことから，サンセルナの方法に改良の余地があることがわかる.

参考文献

1) John R.　Dormand,Numerical Methods for Differential Equations A Computational Approach,1996.
2) R.　E.　Scraton，The numerical solution of second-order differential equations not containing the first　derivative explicitly，The Conputer J.　，　vol.　6,　pp．368-370，1963-1964.
3) 三井 斌友，小藤 俊幸，齊藤 善弘，微分方程式による計算科学入門，共立出版株式会社，（2004）．

Error propagation of some numerical methods for a Hamiltonian system

Furumatu, Kazuharu and Sakakihara, Michio*

Department of Information Science, Graduate School of Informatics,
**Department of Information Science, Faculty of Informatics,*
Okayama University of Science,
1-1 Ridai-cho, Okayama 700-0005, Japan

(Received September 30, 2008; accepted November 7, 2008)

We study some numerical integrations for the Hamiltonian system

$$\frac{dq}{dt}=p \qquad \frac{dp}{dt}=-\pi^2 q \qquad H(q,p)=\frac{1}{2}(p^2+\pi^2 q^2).$$

The Numerical solutions are computed by the Runge-Kutta method proposed by Collatz , the Runge-Kutta-Nystom and simplectic methods (simplectic Euler, Ruth, Sanz-Serna methods). From several numerical experiments ,we investigate some merits and demerits of the simlectic method by comparing with usual Runge-Kutta type methods.

Keywords: Hamiltonian system; numerical method; Runge-Kutta; Simplectic method.