計算天文学 II 第5回 常微分方程式の初期値問題 (2)

牧野淳一郎

2000 年 12 月 6 日

1　今日の予定

今日はまず与えられた精度を達成するためにどのように刻みを調整するかという話をしたあと、ハミルトン系に特化した数値解法の話に移る。なお、今日の資料は必要以上に詳しいが、適当に省略して説明する（予定である）。

2　刻み幅調節と埋め込み型公式

ルンゲクッタにしても線形多段階法を使うにしても、実際に問題を解こうという上ではいろいろ考えないといけないことがある。もっとも重要なことは、刻み幅 h をどうやって決めるかということである。

実際問題としては、解いていくにつれて導関数の値が大きく変わるといったことは普通に起きる。このために、刻み幅が一定のままで計算していくというのは非常に無駄なことが多い。

無駄を減らすためには、局所誤差が小さい（解が滑らかな）ところは刻みを大きく、逆に解が急にかわるところでは刻みを小さくしてやればよい。このような方法を可変刻み (variable step)、あるいは適応刻み (adaptive step) という。

2.1　RK 法の場合

例えば Runge-Kutta 法の場合、x_n から x_{n+1} にいくのに前に計算した情報とかなにかを使うわけではないので、刻み幅は任意にとることができる。問題は、どうやって刻み幅を決めるかである。

これにはいろいろな考え方があるが、通常使われるのは、局所離散化誤差を推定して、それがある値以下になるようにするという方法である。

このための一つの考え方は、以下のようなものである。

1. まず、ある幅 h で積分する。
2. 次に、その同じ幅を、$h/2$ ずつ 2 回に分けて積分する。
3. すると、2 回に分けて積分したほうがより正確な答になっていると期待できるので、二つの解の差が誤差の推定値（大きめではあるが）となっている。

誤差の推定値が求まったら、普通は次のステップを調節する。局所離散化誤差の次数がわかっているから、それに応じてステップサイズを調整すればよい。次数プログラムによっては、現在のステップでの誤差が予定した値よりも大きければステップを小さくして計算し直すようになっているものもある。

実装（プログラムを作ること）が容易であることもあって、この方法はわりと広く使われている。が、かなり無駄が多い方法であるというのも確かである。というのは、単に誤差の推定のためだけに、50% の無駄な計算をしているからである。まあ、50% はたいしたことないという考え方もあるが、計算に何日も掛かるというような状況なら 50% は無視できないので、まあ、なんとかしたくなるのが人情というものである。

というわけで、もうちょっとうまい方法はないかということで、以下のようなことを考えた人がいる。

一般に、RK 型の公式では、最終的な値は

$$x_{n+1} = x_n + \sum_{i=1}^{s} b_i k_i \tag{1}$$

の形になっている。ここで、k_i は全部そのまま使って、b_i を別の b_i' に置き換えた

$$x' = x_n + \sum_{i=1}^{s} b_i' k_i \tag{2}$$

で、局所離散化誤差が元の公式よりも大きいが、むやみと大きくはない（例えば、一次次数が低い）ものがあれば、元の公式との差を誤差の推定に使うことができる。

この形の公式のことを埋め込み型 embedded 公式という。最初に提案した人の名前をとって Runge-Kutta-Fehlberg 公式ということも多い。これもいろいろ提案されているが、前回にも紹介した Dormand-Prince 公式はすべて埋め込み型であり、これが最近はもっとも広く使われている。精度が高いものが必要な時は、8 次の公式が使われる。これらは

`http://www.unige.ch/math/folks/hairer/software.html`

から入手できる (Fotran と C がある)。

2.2 線形多段階法の場合

線形多段階法の場合、RK と違って誤差の推定は容易である。例えば、アダムス法で予測子・修正子ペアで使うなら、予測子と修正子の差は誤差の（オーダーとしては）よい推定値になっている。したがって、この部分については面倒なことは特にない。

問題は、実際に刻みを変えるほうである。もっとも一般的な方法は、「その場で公式を導出する」というものである。これについて以下簡単に説明する。

2.3 ニュートン補間とアダムス公式の一般的導出

アダムス法を使うには、要するに多項式補間の系数が出せればよい。以下、ニュートン補間を使う方法を説明する。

補間したい関数 $f(x)$ が、標本点 $(x_0, x_1, ...x_n)$ で、関数値 $(f_0, f_1, ...f_n)$ をとるとする。これを、以下のような形の多項式

$$P(x) = a_0 + a_1(x - x_0) + a_2(x - x_0)(x - x_1)... + a_n(x - x_0)\cdots(x - x_{n-1}) \tag{3}$$

という形に書くことを考える。これを、a_p までをとったものは $x_0 \cdots x_p$ までを通る最低次補間多項式になっているように構成することにする。で、低い次数から順に作っていく。付け加える新しい項は、それまでに使った点すべてで 0 になるので、新しい点で標本と一致するように a_i の値を決めればいい。

まず、$n=0$ については、 $a_0=f_0$ とすればいいのは明らかであろう。次に $n=1$ であるが、

$$P(x_1)=f_0+a_1(x_1-x_0)=f_1 \tag{4}$$

から

$$a_1=\frac{f_1-f_0}{x_1-x_0} \tag{5}$$

となる。同様に、 a_2を求めると、

$$a_2=\frac{f[0,2]-f[0,1]}{x_2-x_1} \tag{6}$$

ただし、

$$f[i,j]=\frac{f_i-f_j}{x_i-x_j} \tag{7}$$

である。

さて、段々式が繁雑になるが、もうちょっとの辛抱である。上の形は、

$$a_2=\frac{f[2,1]-f[1,0]}{x_2-x_0} \tag{8}$$

というふうにも書き直せることに注意しよう。これは、$(1,2)$ を通る補間式の一次の係数と、 $(0,1)$ を通る補間式の係数の差みたいなものになっている。

ここで、天下りに、 k 階差商 (divided difference) $D_{k,l}\quad(0\leq l\leq n-k)$ というものを導入する。これは以下のように定義される。

$$\begin{aligned} D_{0,l} &= f_l \quad (0\leq l\leq n) \qquad (9)\\ D_{k,l} &= \frac{D_{k-1,l}-D_{k-1,l+1}}{x_l-x_{l+k}} \qquad (10)\end{aligned}$$

実は、このように定義された D が、

$$D_{k,0}=a_k \tag{11}$$

を満たす、求める係数であることを示すことが出来る。

証明には、$D_{k,l}$が、 x_lから始まる $k+1$ 点を通る補間多項式の係数であるということを用いる。定義により

$$D_{k,0}=\frac{D_{k-1,0}-D_{k-1,1}}{x_0-x_k} \tag{12}$$

であるの。ここで、帰納法を使って証明することにすると、

$$P_{k-1}(x)=D_{0,0}+D_{1,0}(x-x_0)+\cdots+D_{k-1,0}(x-x_0)\cdots(x-x_{k-2}) \tag{13}$$

は、 $x_0,\cdots x_{k-1}$ を通る $k-1$ 次補間多項式であり、また、

$$P'_{k-1}(x)=D_{0,1}+D_{1,1}(x-x_1)+\cdots+D_{k-1,1}(x-x_1)\cdots(x-x_{k-1}) \tag{14}$$

は、 $x_1,\cdots x_k$ を通る $k-1$ 次補間多項式であるとしてよい。この 2 つの線形結合によって、$x_0,\cdots x_k$ を通る補間多項式を作るには、

$$P_k=\frac{(x-x_0)P'_{k-1}-(x-x_k)P_k}{x_k-x_0} \tag{15}$$

とすればよい。ここで、$D_{k-1,0}$と $D_{k-1,1}$は、それぞれ P_{k-1}と P'_{k-1} の最高次の係数であることに注意すると、 P_kの最高次の係数 (これは a_kに等しい) は、$D_{k,0}$で与えられることがわかる。

さて、

$$Q_k(x)=D_{0,0}+D_{1,0}(x-x_0)+\cdots+D_{k,0}(x-x_0)\cdots(x-x_{k-1}) \tag{16}$$

という多項式を考えると、これは $x_0, \cdots x_{k-1}$ で P_kと一致し、さらに最高次の係数も一致しているので、結局 $Q_k = P_k$ であることがわかる。つまり、 $Q_k(x)$ が求める補間多項式であり、 $D_{k,0}$がその最高次の係数ということになる。

と、こんな風に差商を作っておくと、これから多項式の係数を機械的に計算して積分して、、、、ということができる。さらに、差商の形でデータをとっておくと、上の漸化式を使って D を順番に更新することができる。これは Krogh 型の公式と呼ばれ、かなり広い範囲の問題について、もっとも効率が良い公式であることがわかっている。

なお、上の方法で時間刻みを変えられるなら、出発公式は不必要になることに注意しておく。つまり、最初は 1 次の予測子、2 次の修正子から出発して、ステップ毎に次数をあげていけばいい。ステップサイズは次数を考慮して決めておく。

3 ハミルトン系向けの方法

3.1 簡単な例題

古典力学系のもっとも簡単な例といえば、一次元調和振動子、つまり、運動方程式では

$$\frac{d^2x}{dt^2} = -kx \tag{17}$$

である。これの解はもちろん単振動するものであり、それは固有値が純虚数であるからである。

さて、前にも少し述べたように、このような、固有値が純虚数である、いいかえれば中立安定な場合、安定性解析はちょっと厄介になる。というのは、通常の意味で安定というのは、数値解がいつかは原点にいってしまうということ、いいかえればエネルギーが保存しないということを意味するからである。

つまり、安定領域のある公式では、ほとんどのもので虚軸上の一定範囲では数値解が「安定」になってしまう。つまり、本当の解はいつまでも振動を続けるのに、数値解は減衰してしまうのである。もちろん、タイムステップを大きくとれば、A 安定でない限り安定領域から外れるのが普通であり、振動しながら広がっていくような解になる。安定領域に虚軸を含まないような公式（例えば前進オイラー公式）の場合では、かならず軌道が広がっていくことになる。つまり、虚数軸が安定性限界になっていない限り、必ず軌道から一方的に外れていってしまうのである。

あ、安定領域とか A 安定とかいう話をしてなかったような気が、、、ええと、つまり、線形常微分方程式

$$\frac{dy}{dx} = kx \tag{18}$$

を刻み h で積分した時に、これは結局 $y_n = C\lambda^n$ という形の一般解を持つ。ここで、すべての固有値 λ の絶対値が 1 を超えないような、複素平面上での kh の領域のことを安定性領域という。

k が複素数の場合も考えるのは、元の微分方程式が連立方程式なら固有値が実数でない場合もありえるからである。でもって、A 安定とは、安定領域が左半平面全体を含むことである。これは、もとの方程式が安定なら数値解もかならず安定であるということ。もとの方程式が不安定でも数値解は安定になっちゃってるかもしれないが、これは気にしないというのが A 安定の定義である。

つまるところ、線形系では安定性限界が虚数軸である（数値解に純虚数の固有値がある）というのが、数値解が厳密に振動的であるための必要十分条件ということになる。この時、数値解はもとの系の性質をある意味で良く表しているといえるであろう。

実は多変数の場合や非線形の場合でも本質的な事情は変わらない。ただし、こちらはまだいろいろ理論的にはっきりわかっていないことがある。が、大雑把にいうと同じような事情が成り立っている。つまり、もと

が周期解であるときに、大抵の積分法では周期解から一方的にずれていく、つまり、保存量であるはずのエネルギー等が保存しなくなる。

もちろん、エネルギーが厳密には保存しないということが問題であるかどうかというのも実は難しい問題である。というのは、保存しないといってももちろん数値解の精度では保存しているわけだから、それでかまわないのではないかと考えられるからである。

3.2 リープフロッグ公式

ハミルトン系のシミュレーションの例には例えば以下のようなものがある

- プラズマシミュレーション
- （古典）分子動力学
- 銀河動力学

これらはいずれも、古典的な多体問題として定式化される。プラズマの場合は磁場も入るのでちょっと面倒だが、それを無視すれば運動方程式が

$$m_i \frac{d^2 \boldsymbol{x}_i}{dt^2} = \sum_{j \neq i} \boldsymbol{f}_{ij} \tag{19}$$

つまり、ある粒子 i の加速度は他のすべての粒子からの力の合計ということになる。もちろん、古典力学系は他にもいろいろあるが、基本的なアプローチは似たようなものである。

このような問題に対して、もっとも普通に使われる公式は以下の leapfrog といわれるものである。

$$\begin{aligned} v_{i+1/2} &= v_{i-1/2} + \Delta t a(x_i) && (20) \\ x_{i+1} &= x_i + \Delta t v_{i+1/2} && (21) \end{aligned}$$

これでは速度と位置がずれた時間でしか定義されないが、出発用公式として

$$v_{1/2} = v + \Delta t a(x_0)/2 \tag{22}$$

を使い、さらに終了用公式として

$$v_i = v_{i-1/2} + \Delta t a(x_i)/2 \tag{23}$$

を使うことで最初と最後を合わせることが出来る。この形は、実は

$$\begin{aligned} x_{i+1} &= x_i + \Delta t v_i + \Delta t^2 a(x_i)/2 && (24) \\ v_{i+1} &= v_i + \Delta t[a(x_i) + a(x_{i+1})]/2 && (25) \end{aligned}$$

と数学的に等価である（証明してみること）また、以下のようにも書ける

$$\begin{aligned} v_{i+1/2} &= v_i + \Delta t a(x_i)/2 && (26) \\ x_{i+1} &= x_i + \Delta t v_{i+1/2} + \Delta t^2 a(x_i)/2 && (27) \\ v_{i+1} &= v_{i+1/2} + \Delta t a(x_{i+1})/2 && (28) \end{aligned}$$

さらにまた、速度を消去して x_{i-1}, x_i, x_{i+1} の関係式の形でかいてあることもあるかもしれない。なお、すべて違う名前がついていたりするが、結果は丸め誤差を別にすれば完全に同じである。時々、これらが違うものであるかのように書いてある教科書があるので注意すること。

この公式は局所誤差が $O(\Delta t^3)$、大域誤差が $O(\Delta t^2)$ である。

さて、局所誤差という観点からはこれは決して良い公式というわけではないが、現実にはこの公式は非常に広く使われている。

これは、別にもっとよい方法を知らないからとかではなく、実はこの方法がいくつかの意味で非常に良い方法であるからである。いくつかの意味とは、例えばエネルギーや角運動量のような保存量が非常によく保存するということである。これらの保存量については多くの場合に誤差がある程度以上増えない。

この、ある程度以上誤差が増えないというのは目覚しい性質である。通常の方法では、エネルギーの誤差は時間に比例して増えていく。従って、長時間計算をしようとすればそれだけ正確な計算をする必要がある。ところが、エネルギーの誤差は溜っていかないのならば、かならずしも精度を上げる必要はないとも考えられる。

もちろん、エネルギーが保存していればそれだけで計算が正しいということにはならない。が、理論的には、いくつかの重要な結果が得られている。まず、

1. leapfrog は symplectic method のもっとも簡単なものの一つである。
2. leapfrog は symmetric method のもっとも簡単なものの一つである。

Symplectic method については、以下のようなことが知られている

1. symplectic method は、すくなくともある種のハミルトニアンに対して使った場合に、それに近い別のハミルトン系に対する厳密解を与えることがある。
2. 周期解を持つハミルトン系に対して使った場合に、どんな量でも誤差が最悪で時間に比例してしか増えない。
3. 時間刻を変えると上のようなことは成り立たなくなる

これに対し、 symmetric method については以下のようなことが知られている

1. 周期解を持つ時間対称な系に対して使った場合に、どんな量でも誤差が最悪で時間に比例してしか増えない。
2. 時間刻を変えてもうまくいくようにすることも出来る。

以下、まず数値例でこれらの性質を確認し、それからなぜこのようなうまい性質を持つのかについて直観的な説明を与えよう（厳密な説明／証明には力学系の積分可能性に関するかなり深い知識が必要となる）。

3.3 数値例

3.3.1 調和振動子

能書きを聞いていても良くわからないので、実例を見てみよう。まず、簡単な例として調和振動子

$$\frac{d^2x}{dt^2} = -x \tag{29}$$

を leap frog と 2 階のルンゲクッタで解いた例を示す。初期条件は $(x, v) = (1, 0)$ で、時間刻みは $1/4$ である。

軌道とエネルギーを図に示す。非常に特徴的なのは、 leap frog ではエネルギーが周期的にしか変化しないのに対し、ルンゲクッタでは単調に増えていることである。

ルンゲクッタでは単調に変化するというのは前に説明した通り（2 階のルンゲクッタでは虚軸を安定領域に含まないため）である。さて、これに対し、 leapfrog ではエネルギーが変化していないが、これはどういうことなのであろう？

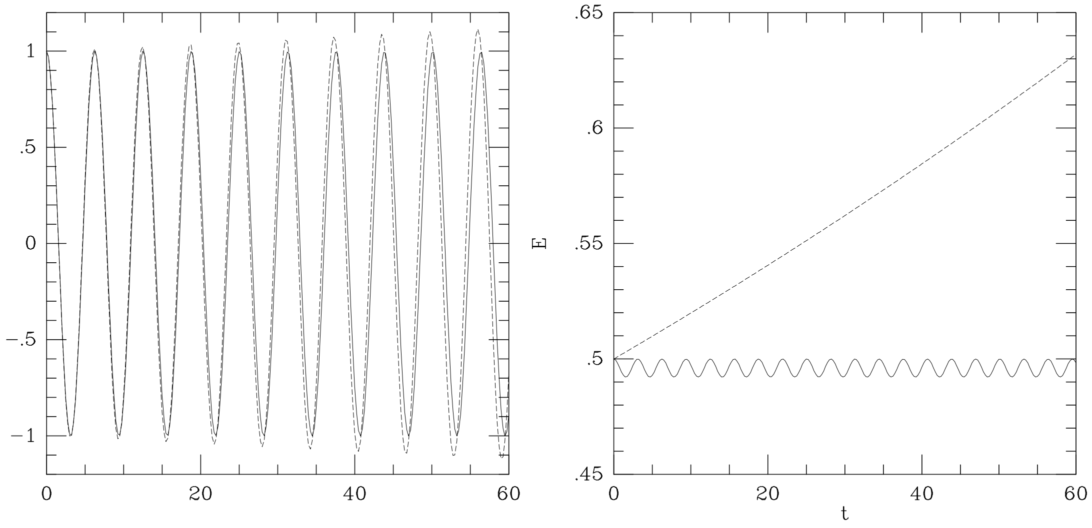

図 1: 調和振動子の数値積分。左 :軌道。右 :エネルギー。破線は 2 次のルンゲクッタ、実線は leapfrog の結果

実は、この調和振動子の場合には、leapfrog 公式は以下の量

$$H' = \frac{1}{2}(x^2 + v^2) - \frac{h^2}{4}x^2 \tag{30}$$

を保存するということを確かめることが出来る。つまり、(x, v) で与えられる位相平面の上で考えると、leapfrog 公式の解は上の式で与えられる楕円の上にのっているのである。このために、エネルギーの誤差がある値よりも大きくなり得ないことになる。

3.4 非線形振動

では、非線形振動ではどうだろう ?簡単な例として

$$\frac{d^2x}{dt^2} = -x^3 \tag{31}$$

を leap frog と 2 階のルンゲクッタで解いた例を示す。初期条件は $(x, v) = (1, 0)$ で、時間刻みは $1/8$ である。

軌道とエネルギーを図に示す。調和振動の場合と同様に、leap frog ではエネルギーが周期的にしか変化しないのに対し、ルンゲクッタでは単調に増えている。

この場合も保存量があるので、頑張れば求まるかもしれない。

3.5 シンプレクティック公式

さて、leapfrog 公式は、上で見たようにハミルトン系に対してエネルギー誤差が有界に留まるという大きな特長がある。が、2 次精度でしかない。もっと高次の方法はないのだろうか、またあるとすればどういう原理で作れるのだろうか。

高次の方法を構成する一つのアプローチが、シンプレクティック公式といわれるものである。これはなにかというと、積分公式がシンプレクティック写像になるように作るということである。

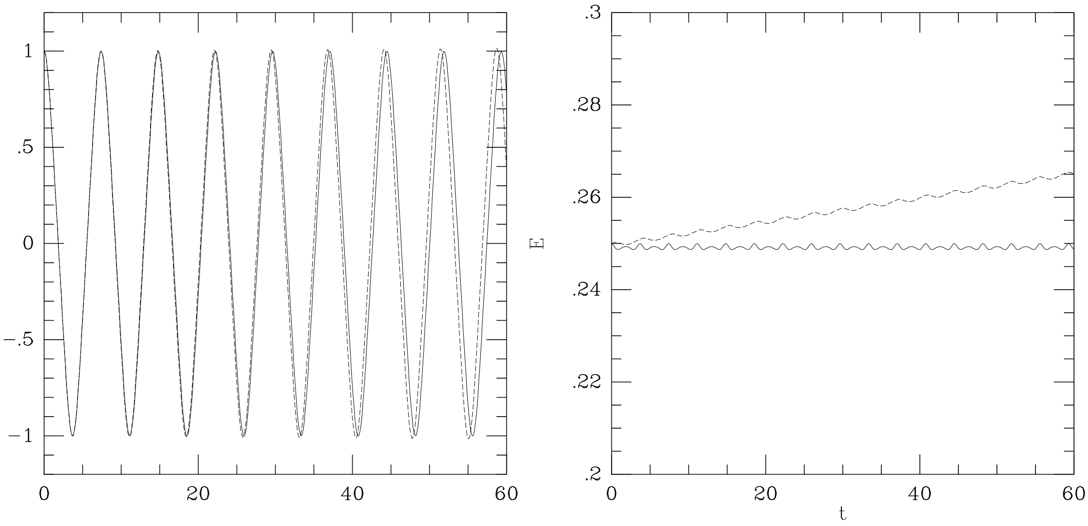

図 2: 非線形振動の数値積分。左 :軌道。右 :エネルギー。破線は 2 次のルンゲクッタ、実線は leapfrog の結果

と、これでは意味がわかりませんね。シンプレクティック写像とは、ようするに正準変換のことである。正準変換とはなにかというのは解析力学を思い出してみて欲しいが、直観的には、力学系を不変に保つ、つまり変換まえの座標系で求めた軌道を変換したものと、変換後の座標系での力学系の軌道が厳密に同じになるようなものである。

ハミルトン力学系の解そのもの (ある時刻 t での座標から、 $t+h$ での座標に移す変換) もシンプレクティックである。まあ、だから、シンプレクティックになっているような積分公式は、そうでないものに比べてなんとなく力学系の性質にあっているような気はする。

で、いいたかったことは何かっていうと、上の leapfrog 公式はこのシンプレクティック性を満たしているということだった。詳しくは、「数理科学」1995 年 6 月号にのった吉田による解説記事でもみてもらうことにして、ここでは高次の公式にはどんなものがあるかという話をしておく。

3.6 陽解法

陽解法の組み立て方はいろいろある。一つは、 RKN 系の公式で、係数をシンプレクティック性を満たすように決めるということである。これはここ 10 年で無数に論文がでた。4 次、あるいは 6 次の公式としては、吉田や鈴木による作用素分解に基づく公式が良く知られている。

これらの方法の原理は、要するに上の leap frog をタイムステップを変えていくつか組合わせるというものである。うまくタイムステップを組み合わせると誤差の高次の項を消すことができるわけである。3 段 4 次の公式、7 段 6 次の公式等が吉田によって導かれている。

なお、実は陽解法はハミルトニアンが $T(p)+V(q)$ の形の場合にしか使えないが、大抵の問題はこう書けることはいうまでもないであろう。

また、 RKN 系の公式を力任せに構成する試みもあり、4 次から 8 次までの公式が作られている。計算精度という観点からはこちらのほうが leapfrog を組合わせるものよりも圧倒的にいいということがわかっている。

3.7 シンプレクティック公式の意味

さて、シンプレクティックであるということと、「良い」ということの間にはちゃんとした理論的な関係があるのであろうか ?一応あるということになっている。つまり、あるハミルトニアン H で表される系をシンプレクティックな p 次の公式を使って積分した解は、別のハミルトニアン H'で与えられるシステムの厳密解になっていて、H と H' の間に

$$H = H' + h^{p+1}H_p + O(h^{p+2}) \tag{32}$$

という関係がある (H'を求める数列が収束すれば) ということがわかっている。

なお、例えば上の調和振動子の場合には実際に数列が収束し、H' が求まっている。が、これは極めて例外的な場合で、一般の場合には収束するかどうかも明らかではないようである。

収束するかどうか明らかではないのでは、使っていいことがあるという保証はないではないかと思うかもしれない。理論的にはその通りなのであるが、実際にはいろいろな問題に適用されて、従来の方法よりも高い精度が得られるということが確認されている。

3.8 シンプレクティック公式の問題点と対応

さて、式 (32) をみるとわかるように、シンプレクティック公式に付随するハミルトニアン H' には時間刻み h が入っている。従って、h をふらふら変えると H' も変わって、結果的に求まった数値解は一つの力学系の軌道ではないなんか変なものになってしまう。ということは、可変時間刻みにするとシンプレクティック公式はうまく働かないのではないかということが想像される。

じつはその通りで、例えばシンプレクティックで埋め込み型のルンゲクッタというものを作って、実際に時間刻みを変えてみた人がいる。その結果、普通のルンゲクッタよりも良くならないということが発見された (1992 年頃)。問題によってはこれは致命的な欠陥となるので、さまざまな対応法が精力的に研究されているのが現状である。が、あまり一般的にうまくいく方法というのは見つかっていないようである。つまり、stiff な問題の場合にあったような、万能な公式というのはシンプレクティック公式に関する限り知られていない。

なお、シンプレクティック公式において普通に時間刻みを変えると、それはシンプレクティックではなくなるということが Gear と Skeel により一般に証明されている。彼らの結果は、時間刻みも含めて考えると、写像が時間方向に歪んだもの (もとの位置によって時間刻みが変わるため) になり、そのために元の公式がシンプレクティックであれば時間刻みを変えると必ずシンプレクティックでなくなるというものである。

それでは、時間刻みを変えるのは絶対に不可能かというと、以下のような考えかたでの研究が進められている。ハミルトニアン H を

$$H = H_1 + H_2 + \cdots \tag{33}$$

と複数の項の和にわけ、それぞれについて違う時間刻みを与えることで実効的に時間刻みを変えるというものである。このへんはまだ研究段階という面が強いので省略。

もう一つのシンプレクティック公式の問題点は、「写像」であるということから一段法、具体的にはルンゲクッタ型の公式であるので、局所誤差に対する計算量という観点からは線形多段階法に比べて必ず悪いということである。

3.9 対称型公式とは

さて、まず対称型公式とはなにかということだが、まず時間反転に対する対称性というものを定義しておこう。時間反転に対する対称性とは、常微分方程式

$$\frac{dy}{dx} = f(x, y) \tag{34}$$

に対する一段法

$$y_{i+1} = F(x_i, y_i, f, \Delta x) \tag{35}$$

が、

$$y_i = F(x_{i+1}, y_{i+1}, -f, \Delta x) \tag{36}$$

を満たすこと、つまり、直観的には、ある微分方程式系があって、それを1ステップ分数値解を求めたとする。で、そこから逆に戻ると厳密に元の値に戻るということである。(ここでは丸め誤差はないものとする)

で、一段法の場合には、この意味で対称なものを対称型公式ということにする。

具体例で考えてみよう。例えば前進オイラー法は対称型ではない。これは、いった先で導関数を計算すれば、一般にもとのところでの導関数とは違うから当然であろう。前進オイラー法が対称ではないのだから、その逆写像である後退オイラー法も対称型ではないことになる。

では、対称型にはどういうものがあるかということだが、明らかに対称型であるものとしては、台形公式

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2}(f_i + f_{i+1}) \tag{37}$$

がある。これが上の対称性を満たしていることはいうまでもない。

さて、なぜこの型の公式を考えるかということであるが、これは実はそれほど簡単な話ではない。実験的には以下のようなことが知られている。

- ハミルトン系に対して対称型公式を使った場合、エネルギーや角運動量などの保存量の誤差がある範囲内にとどまる
- 時間刻みを変えても上の性質を保つことが出来る

前のほうの性質はシンプレクティック公式と同じであるが、後の方の性質はシンプレクティック公式よりもある意味でよいものである。

理論的な話は来週に回して、今日はとりあえず対称型公式にはどんなものがあるかという話をしておこう。

さて、一階の方程式に対する一段法という制限をつけた場合、つまり、ルンゲクッタ法の場合、対称な公式はかならず陰的公式になる。逆に、陰的公式であれば対称型のものを作るのは容易である。つまり、ルンゲクッタ法を与える行列 A とかベクトル b, c が対称になっていればいい。

何度もでてきたので予想されるかもしれないが、陰的ガウス法は対称型公式でもある。

一階の系に対する一段法では、そういうわけですでに紹介してきた陰的 RK のほかにうまい方法があるわけではない。それでは、

- ハミルトン系専用の解法ではどうだろうか
- 多段法ではどうなっているのだろう
- それ以外の方法はないのだろうか

以下、順番に考えていくことにする。

3.10　ハミルトン系用の陽的対称型 RK 公式

実は、すでに述べたように、leapfrog 公式は対称型でありしかも陽公式である。で、leapfrog の組合わせで作られる公式も、実はすべて対称型になっている。

3.11　対称型線形多段法

さて、一段法という枠を外してみよう。

まず、線形多段階法に対する対称性の定義を与える必要がある。ここでは、以下のように定義しておこう。2 階の方程式用の線形多段階法は、一般に

$$\alpha_0 x_{i+p} + \cdots \alpha_p x_i = h^2(\beta_0 f_{i+p} + \cdots \beta_p f_i) \tag{38}$$

という形に書くことができる。$\beta_0 = 0$ なら陽的であるし、そうでなければ陰的公式である。ここで、対称型であるとは、係数が

$$\alpha_i = \alpha_{p-i}, \quad \beta_i = \beta_{p-i} \tag{39}$$

を満たすということである。leap frog をこの形にしたものは、前に出てきた通り

$$x_{i+1} - 2x_i + x_{i-1} = h^2 f_i \tag{40}$$

というものであり、これが上の対称性の定義を満たしていることはいうまでもないであろう。

上の意味で対称な公式は、実際に時間反転に対して対称であるということに注意しておこう。つまり、$(x_i, ...x_{i+p-1})$ から上の式で x_{i+p} を求めたとする。時間を逆転させた解を考えて、$(x_{i+p}, ...x_{i+1})$ から x_i を求めるということを考えても、使う式が時間が逆転していないものと同じになっているのである。

このような公式は、1970 年代から知られていたが、注目されるようになったのは 1990 年代に入ってからである。特にトロント大の Quinlan, Tremaine らが 14 次までの対称型公式を導いた。表 1 にその値を示しておく。

なお、非常に最近（今年）になって、国立天文台の福島によって、Quinlan & Tremaine によるものよりもはるかに良い性質を持つものが導かれている。

ただし、これらの公式に共通する欠陥として、線形解析では安定であっても、非線形問題（例えば、単純なケプラー問題）に適用すると不安定な振動を起こすことがあるという困難があり、これはまだ未解決の問題である。

3.12　エルミート型公式

一般に対称型というわけではないが、4 次の対称型公式を導く特別な方法としてエルミート型（あるいはエルミート・オブレヒホフ型）と呼ばれる公式のクラスについてここで触れておこう。

エルミート型公式は、線形多段階法のアダムス型公式の一つの一般化である。どのような意味において一般化であるかというと、アダムス型と同じように補間多項式を積分することで新しい時刻での値を求めるところは同じである。違うところは、アダムス型公式では補間多項式を作るのに関数の値を使う（ラグランジュ・ニュートン補間）が、エルミート型公式では、関数の導関数の値も使うのである（エルミート補間）。

もっとも単純な発想としては、テイラー法というものがある。つまり、微分方程式

$$\frac{dy}{dx} = f(x, y) \tag{41}$$

表 1: Quinlan & Tremaine 1990 による対称型公式の係数

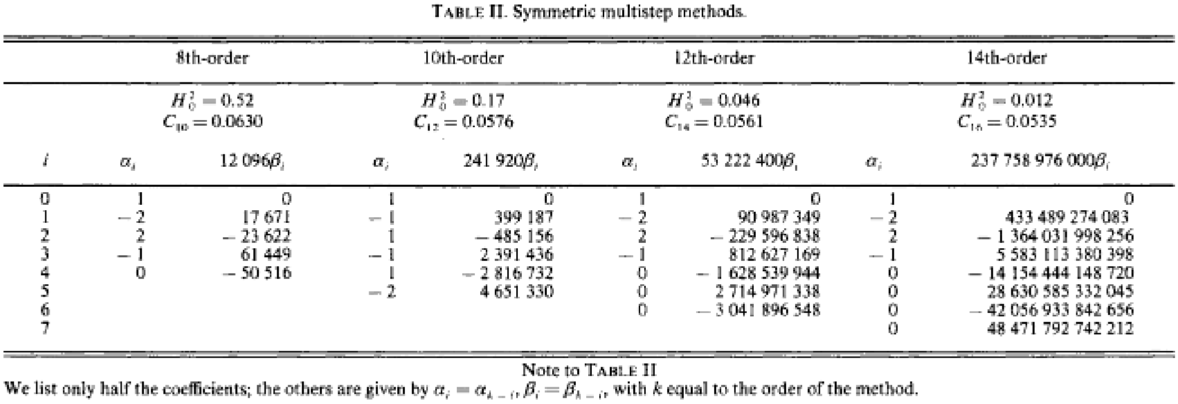

TABLE II. Symmetric multistep methods.

	8th-order		10th-order		12th-order		14th-order	
	$H_0^2=0.52$ $C_{10}=0.0630$		$H_0^2=0.17$ $C_{12}=0.0576$		$H_0^2=0.046$ $C_{14}=0.0561$		$H_0^2=0.012$ $C_{16}=0.0535$	
i	α_i	$12\,096\beta_i$	α_i	$241\,920\beta_i$	α_i	$53\,222\,400\beta_i$	α_i	$237\,758\,976\,000\beta_i$
0	1	0	1	0	1	0	1	0
1	− 2	17 671	− 1	399 187	− 2	90 987 349	− 2	433 489 274 083
2	2	− 23 622	1	− 485 156	2	− 229 596 838	2	− 1 364 031 998 256
3	− 1	61 449	− 1	2 391 436	− 1	812 627 169	− 1	5 583 113 380 398
4	0	− 50 516	1	− 2 816 732	0	− 1 628 539 944	0	− 14 154 444 148 720
5			− 2	4 651 330	0	2 714 971 338	0	28 630 585 332 045
6					0	− 3 041 896 548	0	− 42 056 933 842 656
7							0	48 471 792 742 212

Note to TABLE II

We list only half the coefficients; the others are given by $\alpha_i=\alpha_{k-i}$, $\beta_i=\beta_{k-i}$, with k equal to the order of the method.

というものがあったとしたら、

$$\frac{df}{dx}=\frac{\partial f}{\partial x}+\frac{\partial f}{\partial y}\frac{dy}{dx} \tag{42}$$

という関係式を使って f の全微分を求めることが出来、同様に高次の導関数もどんどん計算していくことが出来る（微分が式で書ければ）。これらを使って直接テイラー級数を評価して近似解を求めるのである。

高次の導関数が簡単に求められる場合（例えば線形な系とか）には、この方法はかなり強力である。線形多段階法やルンゲクッタに比べて誤差項の係数がずっと小さく、タイムステップが大きくとれるからである。

が、多くの問題において、高階導関数の直接計算は現実的ではない。これは、計算量が指数関数的に爆発するのが普通だからである。とはいえ、f の一階導関数や二階導関数くらいならば指数関数的といってもたかがしれている。しかしながら、これではテイラー法では 2 次や 3 次の公式しか作れない。実用的な公式としては、（leap frog のような特別に良い性質をもっているとかいうのでなければ）もうちょっと高次のものが必要である。

そこで考えられるのが、高階導関数を使ってさらにルンゲ・クッタ型とか線形多段階法のような公式を作ることである。例によってもっとも簡単な場合というのを考えると、それは y_i と y_{i+1} のところで f の一階導関数の値を使うもの（高次導関数を使わないものであれば台形公式に相当）の一般化ということになろう。

台形公式は、2 次の陰的アダムス型公式と考えることができる。つまり、f を線形補間してそれを積分しているわけである。これに対し、f と $f'=df/dx$ を使う補間というのはどういうものかということを考えてみると、これは 3 次多項式を構成できることがわかる。具体的には、導関数の近似多項式を

$$f(x_0+h)=f_0+ah+\frac{b}{2}h^2+\frac{c}{3!}h^3 \tag{43}$$

としたとき、

$$\begin{aligned}
a &= f_0' \\
b &= \frac{-6(f_0-f_1)-2\Delta x(2f_0'+f_1')}{\Delta x^2} \\
c &= \frac{12(f_0-f_1)+6\Delta x(f_0'+f_1')}{\Delta x^3}
\end{aligned} \tag{44}$$

という形で係数を求めることが出来る。さらに、上の近似多項式を積分してやれば、結局

$$x_1=x_0+\frac{h}{2}(f_0+f_1)+\frac{h^2}{12}(f_0'-f_1') \tag{45}$$

という形の公式が得られる。これは台形公式と同じく陰的公式である。対称型であることは明らかであろう。

この公式は実装が簡単であるわりには精度が高く、また対称型であるというよい性質をもつこともあり、良く使われるようになりつつあるようである。収束させるための反復には普通の逐次代入が使える。

3.13 対称型一段公式における時間刻みの変更

対称型一段公式には、対称性を保ったままで時間刻みを変更できるというシンプレクティック公式では（普通の意味では）なかった良い性質がある。以下では、どのようにしてそれが可能であるかを簡単に述べておく。

今、任意の対称型一段法があって、その時間刻みを与える関数として $h(x,y)$ が与えられているとする。ここで $h(x,y)$ はなんでもいいが、これも一段法である、つまり前のステップの値とかを必要としないものであるとする。

一般に、$h(x,y)$ によって刻み幅を決めて求めていった数値解は、時間反転に対する対称性を満たしていない。つまり、1 ステップ積分してから、逆に戻すと、タイムステップが変わってしまうためにもとのところに戻らない。このことのために、例えば周期軌道の場合に誤差が周期的にならないということが起こるわけである。

刻み幅を変えつつ時間反転に対する対称性を保つ一つの方法は（これ以外の方法もあるかもしれないが、今のところ知られていない）、$h(x,y)$ 自体に対称性を持たせることである。つまり、一段法を

$$y_1 = y_0 + h(x_0, y_0)F(x_0, y_0) \tag{46}$$

という形に書いた時、

$$h(x_0, y_0) = h(x_1, y_1) \tag{47}$$

がなりたつことを保証するように h を決めるのである。具体的には、上の対称性が成り立っていないような時間刻みの式 h があった時に、

$$h_s = \frac{h(x_0, y_0) + h(x_1, y_1)}{2} \tag{48}$$

によって対称化した時間刻みを作ればいいことになる。この場合時間刻み自体が陰的に決まることになるが、とにかく対称性という要求は満たされるのである。

3.14 対称型一段公式における時間刻みの変更:別のアプローチ

さて、時間刻みの変更にはもう一つ全く違ったアプローチがある。$h(x,y)$ が時間刻みを与える関数であるとすると、新しい独立変数 s を

$$ds = h(x, y)dx \tag{49}$$

によって導入し、元の微分方程式

$$\frac{dy}{dx} = f(x, y) \tag{50}$$

を s を独立変数として書き直す。x はいまや従属変数なので、方程式

$$\frac{dx}{ds} = \frac{1}{h(x, y)} \tag{51}$$

を積分して求める必要があるが、この変換された方程式は s の刻み幅一定で解けることになる。この場合には時間刻みを陰的に決める必要はない。

が、この方法を使った場合、リープフロッグのような陽的方法は多くの場合に使えない。これは、変換したあとの系はハミルトン系になるという保証はないし、そうなるように変換を選んだとしてもハミルトニアンがリープフロッグが使える特別な形（p と q が分離しているもの）になるとは限らないからである。

さらに、元の方程式を書き直す必要があるので、プログラムを書くのは結構大変な作業になることが多いということも、この方法の問題点ではある。

というわけで、前の時間刻みを陰的に変える方法とどちらがいいかは時と場合による。時間刻みの関数 $h(x, y)$ が簡単なもので良ければ、方程式の書換えも単純でありこっちの方法の方が良い結果が得られる。が、h が簡単ではない場合（例えば、埋め込み型 RK 公式から誤差推定が得られ、それを一定値に保つように刻みを決める）には、前節で述べた方法を使うしかない。

4　レポート課題

1 は必須。後はオプション。プログラムが必要なものはプログラムを提出すること。

1. 2 次元ケプラー問題
$$\frac{d^2\boldsymbol{x}}{dt^2} = -\frac{\boldsymbol{x}}{x^3} \tag{52}$$
について、古典ルンゲクッタと leap frog の両方で、適当な初期条件（解が楕円になるものをとること）から出発して 10, 1000, 10^6 周期後の解の厳密解からの誤差が刻み幅のどのような関数になるか調べよ。ここでは刻み幅は固定とする。
2. 4 次のシンプレクティック公式は、$L(h)$ が刻み幅 h の leap frog を表す作用素であるとして、以下のように書ける。
$$\begin{aligned} S_4(h) &= L(d_1h)L(d_2h)L(d_1h), \\ d_1 &= 1/(2-2^{1/3}), \quad d_2 = 1-2d_1 = -2^{1/3}/(2-2^{1/3}) \end{aligned} \tag{53}$$
つまり、リープフロッグでまずちょっと行き過ぎて、次に逆に戻って、最後に最初と同じだけ進んで次の時刻に行くというものである。これをプログラムし、1 と同様な解析を行なえ。
3. 4 次のエルミート公式についても同様な解析を行なえ。説明されているものは陰的公式なので、予測子に何を使えるかは各自検討すること。
4. 2.1 で述べた古典的 RK 法で誤差の調整をする方法をプログラムし、離心率の大きなケプラー問題について刻み一定の場合にくらべてどの程度得になるか調べてみよ。

5　次週予告

来週も、常微分方程式の続き。