

独立時間刻みスキームは「正しい」か？

牧野淳一郎

牧野は今年度何をしていったか

- CfCA プロジェクト長業
 - 無限に沢山トラブルが発生する
 - 早くやめたい
- 4D2U プロジェクト長業
 - (無限)²に沢山トラブルが発生する
 - 早くやめたい
- その他

複数の人に「牧野君は天文台に移ってから元気ないけど」と言われた(一応実話)

そんなことはともかく

概要

独立時間刻み法は全然間違っていた!!!

概要

独立時間刻み法は全然間違っていた!!!
というわけでもないけど

概要

独立時間刻み法は全然間違っていた!!!

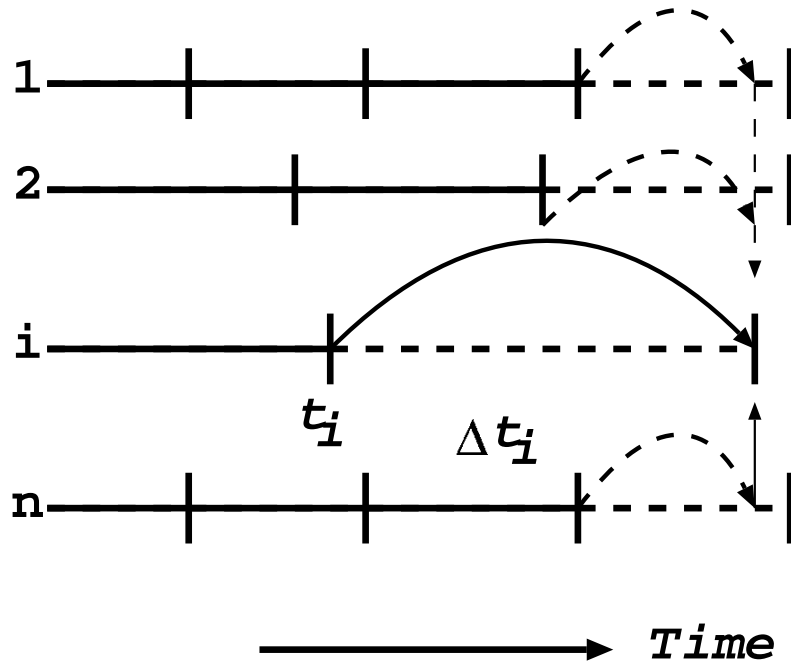
というわけでもないけど

結構問題はある、これまで色々面倒があったのは部分的にはそれが理解されてなかったため。

話の構成

- 独立時間刻み
 - 何故必要か？
 - どういうものか？
- 何が問題と思っているか？
- そんなことが本当に起こるか？
- 対応はあるか？

独立時間刻み



(Aarseth 1963)

- 各粒子にそれぞれ時刻と時間刻みを与える
- 「イベント駆動」時間積分 — $t_i + \Delta t_i$ がもっとも小さい粒子が積分される

時間積分公式に対する要請

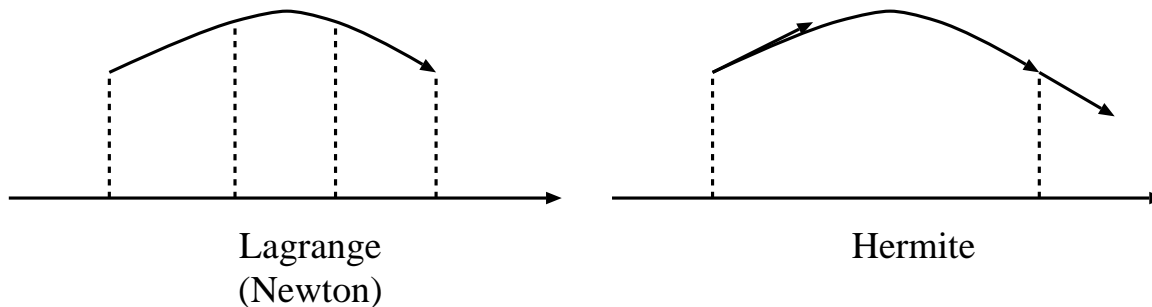
- 高次の予測子が必要 (他の粒子の位置が必要)
- 可変時間刻みが必要
- 積分区間の途中で加速度を計算するような方法は使えない。
 - 線形多段階法は使える
 - ルンゲ・クッタは使えない
 - シンプレクティック法は単純には使えない

時間積分公式

次数：「4次くらいが適当」(JM 1990)。

もっと高いほうが良い: (Nitadori and JM 2007)

- Aarseth scheme (Aarseth 1963): 可変刻みのアダムス法、PEC モード、4次、2階の方程式用。
- Hermite scheme (JM 1990): ラグランジュ補間(ニュートン補間)の代わりに、加速度の一階時間導関数も使ってエルミート補間を構成。



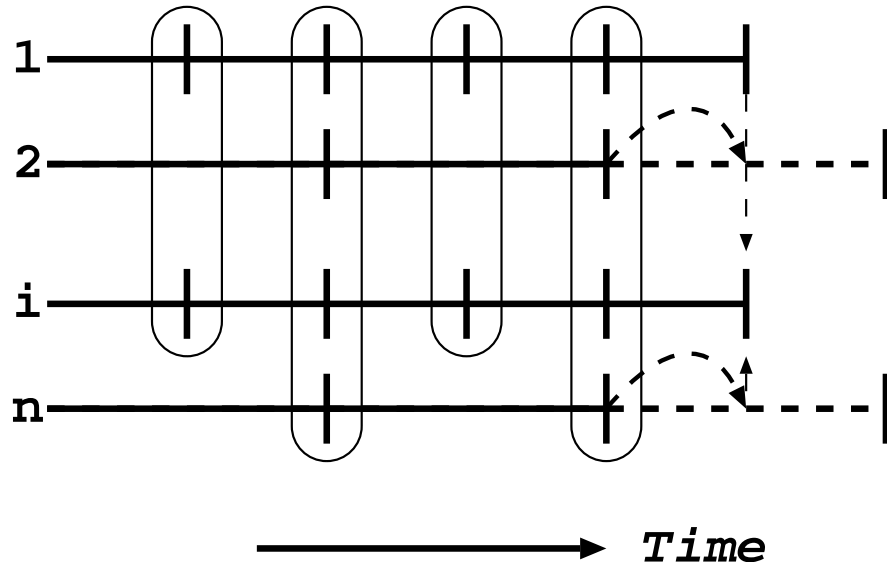
高次エルミート

Nitadori and JM 2007

- 2階導関数まで直接計算してエルミート補間: 6次公式
- 3階導関数まで直接計算してエルミート補間: 8次公式
- 予測子は前のステップの値を使って構成

ブロック時間刻み法

(McMillan 1986) ベクター/パラレル計算機のための改良

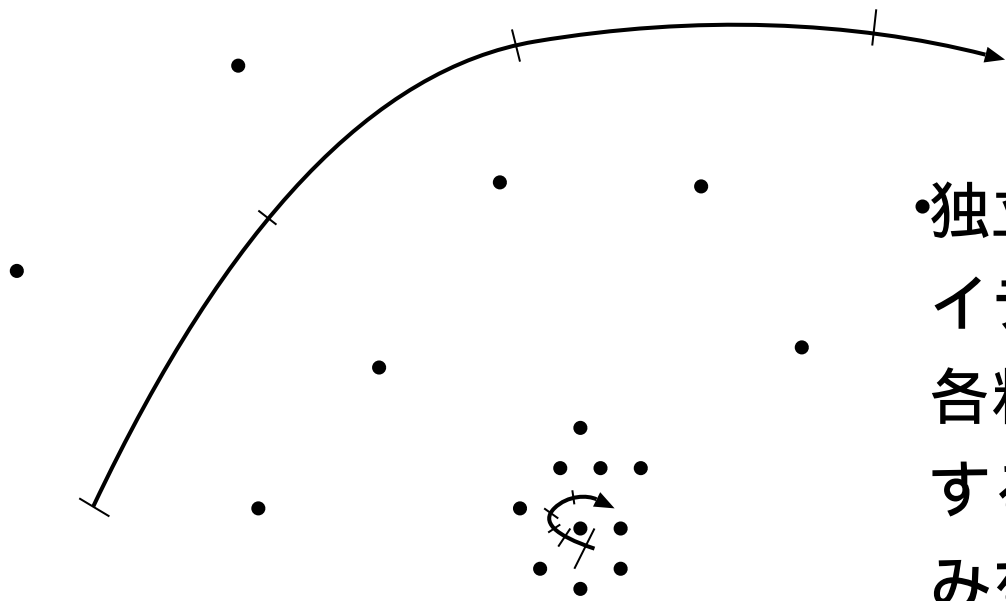


- 時間刻みを 2^{-k} に制限する。
- $t_i + \Delta t_i$ が同じ (Δt_i は違っててもよい) 粒子は同時に積分される。

$O(N_c^{2/3})$ 個の粒子 (N_c は高密度コアのなかの粒子数) を並列計算

— そんなに大きな数ではない。

何が問題とされているか？

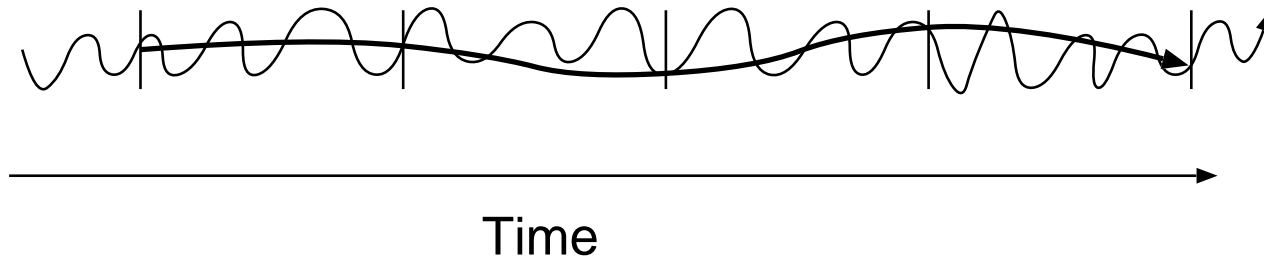


- 独立時間刻みの基本的なアイデア:
各粒子は自分の軌道を分解するのに必要十分な時間刻みを取る

タイムスケールが短い粒子から長い粒子への力はどうなっているのか？

どうなっていると思われるか？

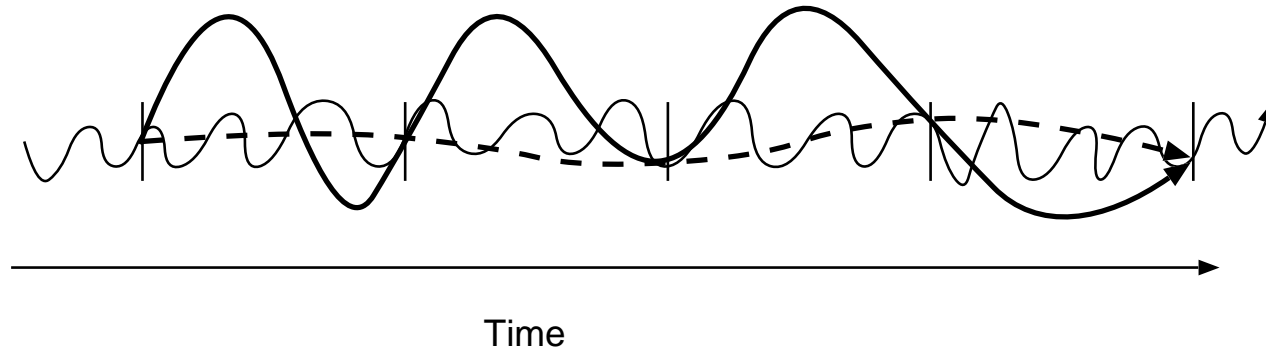
全然デタラメなはず。



- 力は時間スケールの小さい変動をするはず。
- タイムステップが長いと、この力がランダムにサンプルされる。(タイムスケールの短い粒子の軌道が完全に周期的でないなら)

エルミート公式の場合

もっと悪い。

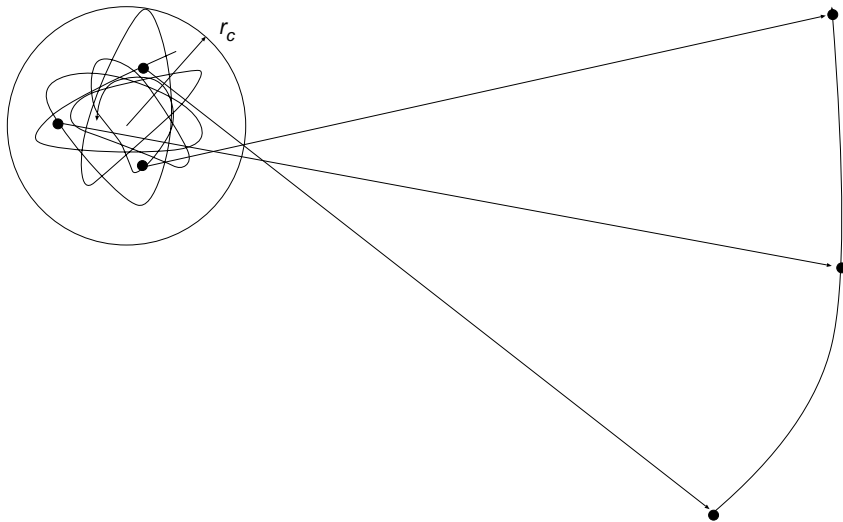


- 導関数の情報を使うべく頑張る
- でも無理
- 無理に計算する

どういつ時に起こるか？

星団の場合:

- コア領域の粒子の軌道タイムスケールが星団の典型的な星の時間刻みより短くなると起こる。
- 大雑把にいてて: $r_c \ll r_h N^{-1/3}$
- 収縮から膨張に移る時: $r_c \sim r_h/N \ll r_h N^{-1/3}$



これは本当に問題か? — 理論的見積もり

- 等温密度カスプ
- 単位系: $M = R = G = 1$ くらい
- Newton 補間 (Aarseth 型公式)

単位時間当りのエネルギー変化を適当に見積もると:

$$\Delta V^2(R) \sim R^{-10/3} N^{-7/3}.$$

- 基本的には数値的な加熱になる
- コアが小さいと系全体で発散

導出

結構面倒な上に微妙

ある半径 R にいる粒子への、 $r (\ll R)$ にいる粒子からの力を1ステップ(ステップサイズ τ) 積分した結果の速度の誤差:

$$\Delta V = \tau \langle a \rangle - a_{sample},$$

$\langle a \rangle$ は本当の平均誤差、 a_{sample} はサンプルした時の値
これを1タイムユニット取ると

$$\langle \Delta V^2 \rangle = \tau \langle (\langle a \rangle - a_{sample})^2 \rangle \sim \tau \left(\frac{mr}{R^3} \right)^2.$$

仮定: 粒子は平均すると中心にいる。サンプルした時は r くらいの距離のどこかにランダムにいる。

導出 (続き)

この問題が起きるためには

$$r < r_n = R^{2/3} N^{-1/3}.$$

この中に粒子は $N r_n$ 個いる。また、 $\tau \sim r_n$ 。この全部が前のスライドくらいの速度変化を起こすとすると

$$\Delta V^2(R) \sim R^{-10/3} N^{-7/3}.$$

コアサイズが有限 (r_c) だとすると、上の議論から

$$R_c \sim r_c^{3/2} N^{1/2}$$

の外側の粒子だけ影響を受ける。この時全体の数値的加熱は

$$\propto r_c^{-7/2} N^{-7/6}$$

定性的には

- コアの少し外側の粒子が一番影響を受ける
- コアが小さくなると影響が急激に大きくなる
- タイムステップを小さくしても、根本的には問題は解決しない

エルミート型公式の場合

等温密度カスプだと

- 4次エルミートでは Aarseth 型公式と同じ
- 6次以上では中心で誤差が発散する

実際問題としてはどれくらい悪そうか？

- 現実的な星団の計算ではそんなに厳しくないかも
 - コアが小さい時間は短い
 - 星の質量分布があるとコアは大きくなる
- 等質量の星の星団は厄介
- 中心ブラックホールがあると必ず破綻

本当に問題は起こるか？

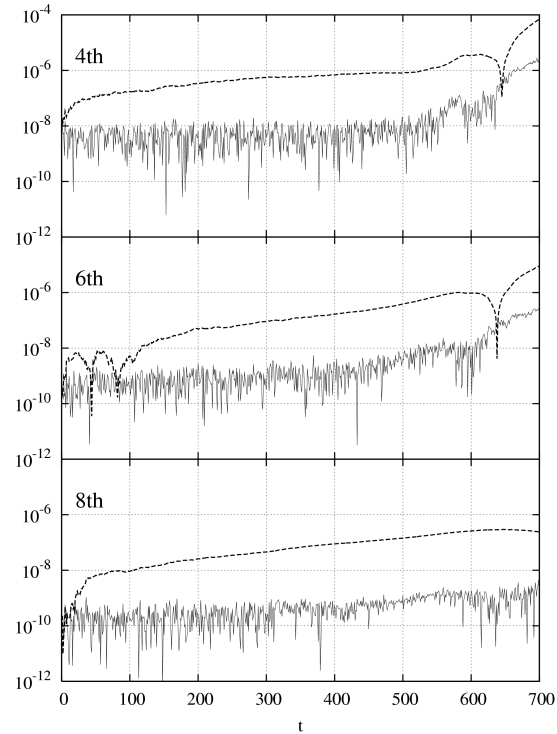
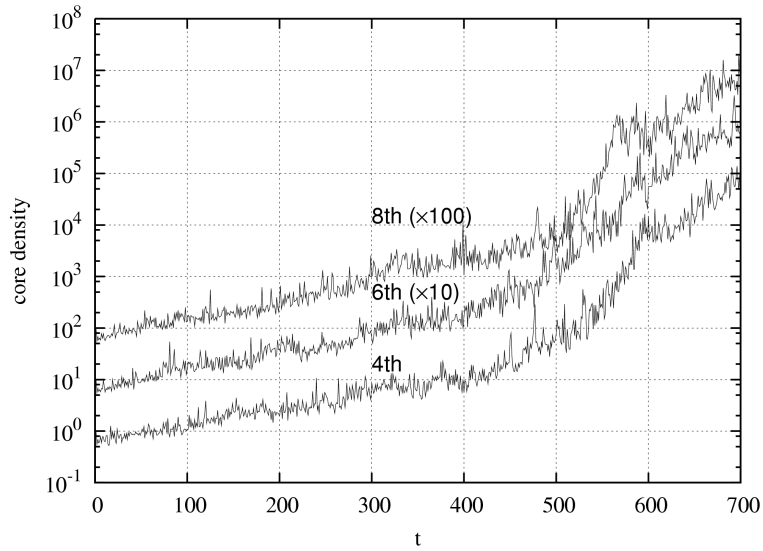
コアが小さくなるとエネルギー誤差が急激に増大する

ということは昔からなんとなく知られていたが、コア自身の積分誤差だとみんな思っていた。

そうではないらしいと判明: Nitadori and JM 2007 の数値実験

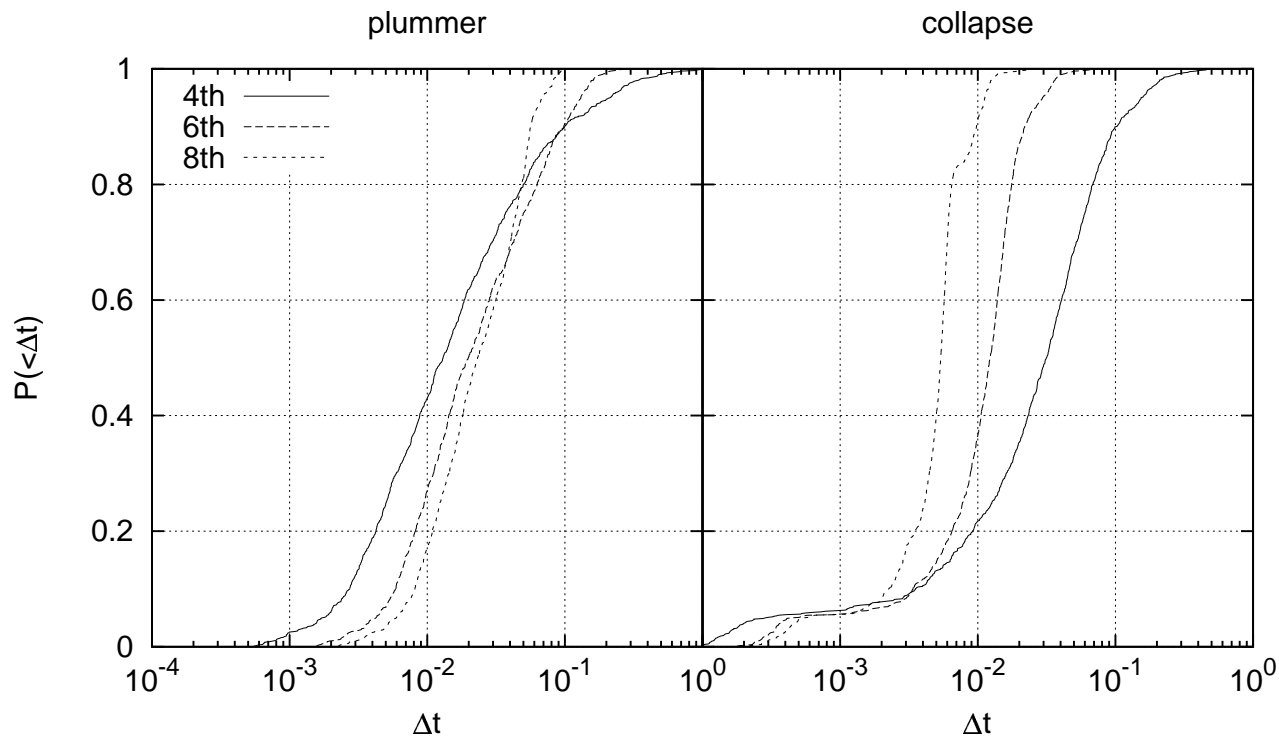
やったこと: 1024 体プラマーモデルをコラプスまで計算

中心密度と誤差



8次スキームだとコラプスしても誤差が増えない。

タイムステップ



左:初期条件、右:コラプスした後

- 基本的に外側のほうがタイムステップ長い
- 8次スキームは全体に時間ステップが短くなっている
- 4次スキームでは外側のほうは長いまま

解釈

- 8次スキームでは、外側の粒子がコアの粒子の軌道変化のためにタイムステップが短くなる
- そのため、コラプスしても誤差が増えない
- 4次スキームではそうならない
- 6次は中間的
- 8次スキームは安全だが、「独立時間刻み」といえるか？
- 一番短いタイムステップの30倍程度が限界？

もうちょっと上手くやる方法は？

全くアイデアだけ:

- 粒子毎ではなく、相互作用毎に時間ステップを定義する
- コア粒子から外側の粒子への力はなんらかの方法で時間平均する

まとめ

- 独立時間刻み法にはこれまで気が付かれていなかった根本的な問題がある。
- タイムスケールの短い粒子から長い粒子への力は、短いタイムスケールで分解しないと計算が破綻するが現在の方法はそうになってない。
- といっても、分解してしまおうと計算コストが上がる。
- 高次エルミート公式はコラプスした系でも安全である。
- もうちょっと抜本的に改良された方法が必要。

6th and 8th-order Hermite schemes

- fourth-order Hermite scheme is not widely used.
- For many problems, higher order schemes can be advantageous.
- GRAPE-DR (unlike previous GRAPEs) can be used with whatever schemes.

Two different ways to achieve higher orders

- Use previous timesteps
- Calculate 2nd (for 6th) and 3rd (for 8th) time derivatives directly.

The latter approach

- is easier to program.
- has much smaller error coefficient
- can be made time-symmetric

Acceleration and derivatives

$$a_{ij} = m_j \frac{r_{ij}}{r_{ij}^3},$$

$$\dot{j}_{ij} = m_j \frac{v_{ij}}{r_{ij}^3} - 3\alpha a_{ij},$$

$$s_{ij} = m_j \frac{a_j - a_i}{r_{ij}^3} - 6\alpha \dot{j}_{ij} - 3\beta a_{ij},$$

$$c_{ij} = m_j \frac{\dot{j}_j - \dot{j}_i}{r_{ij}^3} - 9\alpha s_{ij} - 9\beta \dot{j}_{ij} - 3\gamma a_{ij}.$$

Acceleration and derivatives (cont'd)

$$\alpha = \frac{\mathbf{r}_{ij} \cdot \mathbf{v}_{ij}}{r_{ij}^2},$$

$$\beta = \frac{|\mathbf{v}_{ij}|^2 + \mathbf{r}_{ij} \cdot (\mathbf{a}_j - \mathbf{a}_i)}{r_{ij}^2} + \alpha^2,$$

$$\gamma = \frac{3\mathbf{v}_{ij} \cdot (\mathbf{a}_j - \mathbf{a}_i) + \mathbf{r}_{ij} \cdot (\mathbf{j}_j - \mathbf{j}_i)}{r_{ij}^2} + \alpha(3\beta - 4\alpha^2),$$

Predictor and corrector

Predictors: Usual polynomial form.

Caution: need to predict acceleration (and jerk for 8th order) and need to use one previous value(s) to construct higher-order terms.

Correctors:

$$v_{i,c} = v_{i,0} + \frac{\Delta t}{2}(a_{i,1} + a_{i,0}) - \frac{\Delta t^2}{10}(j_{i,1} - j_{i,0}) + \frac{\Delta t^3}{120}(s_{i,1} +$$

$$v_{i,c} = v_{i,0} + \frac{\Delta t}{2}(a_{i,1} + a_{i,0}) - \frac{3\Delta t^2}{28}(j_{i,1} - j_{i,0}) \\ + \frac{\Delta t^3}{84}(s_{i,1} + s_{i,0}) - \frac{\Delta t^4}{1680}(c_{i,1} - c_{i,0}) + O(\Delta t^9),$$

Timestep criterion

“Generalization” of the standard one:

$$\Delta t = \eta \left(\frac{|a^{(0)}| |a^{(2)}| + |a^{(1)}|^2}{|a^{(p-3)}| |a^{(p-1)}| + |a^{(p-2)}|^2} \right)^{1/(2p-6)} .$$

seems to work fine.

Numerical result

- $N = 1024$,
Plummer model,
 $\epsilon = 4/N$
- Higher order schemes actually work.
- They allow much larger timesteps than that for the 4th order scheme for practical range of accuracy.