数値解析（松尾）　配付資料　　2019 年 12 月 16 日

発展的話題：微分方程式の幾何学的数値解法（構造保存数値解法）

物理の問題を，物理らしく解く数値解法.
$\simeq$ 方程式の根幹を成す幾何学的構造を離散化後も保存する数値解法.

大昔物理学者によって原型が考案された（1900 年〜1960 年代頃）あとは数値解析学分野で発展したが（1980 年代〜2000 年代），最近は物理学分野にも新展開が還流し，物理学者によって再び使われるようになっている（2010 年代〜）.

■ Symplectic 数値解法

Hamilton 系：$\boldsymbol{z} = (\boldsymbol{q}, \boldsymbol{p})^\top$（$\boldsymbol{q}, \boldsymbol{p} \in \mathbb{R}^d$），$H(\boldsymbol{q}, \boldsymbol{p})$ を Hamiltonian として

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\boldsymbol{z} = J\nabla H(\boldsymbol{z}), \qquad \text{where} \quad J = \begin{pmatrix} 0 & I \\ -I & 0 \end{pmatrix}.$$

Symplectic Euler 法：

$$\frac{\boldsymbol{p}^{(m+1)} - \boldsymbol{p}^{(m)}}{\Delta t} = -\frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{q}}(\boldsymbol{q}^{(m)}, \boldsymbol{p}^{(m)}), \quad \frac{\boldsymbol{q}^{(m+1)} - \boldsymbol{q}^{(m)}}{\Delta t} = \frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{p}}(\boldsymbol{q}^{(m+1)}, \boldsymbol{p}^{(m+1)}).$$

Hamiltonian が「separable」$:= H(\boldsymbol{q}, \boldsymbol{p}) = T(\boldsymbol{p}) + V(\boldsymbol{q})$ のとき，これは陽解法.

Symplectic 解法は以下の特徴を持つ.

- （定義）解法の定める離散写像が symplectic（正準変換）.
- 「影の Hamiltonian」$:= \tilde{H} = H + \Delta t H_1 + \Delta t^2 H_2 + \cdots$ が（形式的に）存在し，その定める軌道上に近似解が乗る.

■ 離散勾配法

離散勾配：滑らかな関数 $f : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ に対して，$\nabla_{\mathrm{d}} : \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^d$ が「離散勾配」であるとは，すべての $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^d$ に対して，以下を満たす場合を言う.

- $\nabla_{\mathrm{d}} f(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) \cdot (\boldsymbol{y} - \boldsymbol{x}) = f(\boldsymbol{y}) - f(\boldsymbol{x})$,
- $\nabla_{\mathrm{d}} f(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}) = \nabla f(\boldsymbol{x})$.

次の形の微分方程式を考える（「勾配流」と呼ぶ．特殊ケースとして Hamilton 系も含まれる）.

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\boldsymbol{z} = A\nabla H(\boldsymbol{z}), \qquad A : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^d.$$

係数行列 A が歪対称（$A^\top = -A$）のときこれは「保存系」$:= (\mathrm{d}/\mathrm{d}t)H = 0$，半負定値のとき「散逸系」$:= (\mathrm{d}/\mathrm{d}t)H \leq 0$.

次の算法：「離散勾配法（スキーム）」は，この保存性・散逸性を離散系でも担保する.

$$\frac{\boldsymbol{z}^{(m+1)} - \boldsymbol{z}^{(m)}}{\Delta t} = A\nabla_{\mathrm{d}} H(\boldsymbol{z}^{(m+1)}, \boldsymbol{z}^{(m)}).$$

このスキームは残念ながら常に陰的である.

離散勾配は一般に（ひとつの H に対して）無数に存在する．簡単な場合は視察により因数分解するのがよい．より一般的な公式もいくつか知られている.

例：(Gonzalez (1996))

$$\nabla_{\mathrm{d}} H(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) := \nabla f(\boldsymbol{z}) + \frac{f(\boldsymbol{y}) - f(\boldsymbol{x}) - \nabla f(\boldsymbol{z}) \cdot (\boldsymbol{y} - \boldsymbol{x})}{\|\boldsymbol{y} - \boldsymbol{x}\|^2}(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{x}), \qquad \boldsymbol{z} := (\boldsymbol{x} + \boldsymbol{y})/2.$$

演習．余力があれば次の 2 点を示してみよ．(i) Gonzalez の離散勾配が実際に離散勾配の定義を満たすこと，(ii) 上の離散勾配スキームが離散的な保存性・散逸性をもつこと.

[参考文献]

E. Hairer, C. Lubich, and G. Wanner, Geometric Numerical Integration, Springer, Heidelberg, 2006.
(※適切なリンクから行くと東大でダウンロード可能)

松尾宇泰, 宮武勇登, 微分方程式に対する構造保存数値解法, 日本応用数理学会論文誌, **22** (2012), 213–251.
(※オープンアクセス)