調和振動子でのエネルギー保存は積分スキームによってどう違うか

菊池誠

平成10 年 2 月 12 日

一次元調和振動子の運動方程式を数値積分するとき、積分スキームによってエネルギーの保存がどのように破れるかを検討する。

無次元化した運動方程式は

$$\begin{cases} \dot{p} & = -q \\ \dot{q} & = p \end{cases}$$

1 Euler 差分

一番簡単な Eiler 差分について、計算過程を少し詳しく書いておくことにする。差分によって、時間を Δt だけ進める式は

$$\begin{cases} p(t+\Delta t) & = p(t) - q(t)\Delta t \\ q(t+\Delta t) & = q(t) + q(t)\Delta t \end{cases}$$

ここで、n ステップ目の値を (p_n, q_n) とすると、1 ステップ分の時間発展は 2 次元写像

$$\begin{pmatrix} p_{n+1} \\ q_{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & -\Delta t \\ \Delta t & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p_n \\ q_n \end{pmatrix} \equiv T_0 \begin{pmatrix} p_n \\ q_n \end{pmatrix}$$

で表わされる。T_0 は 1 ステップ分の時間発展行列。1 ステップで生じる誤差は

$$\begin{pmatrix} p_{n+1} \\ q_{n+1} \end{pmatrix}_{true} - \begin{pmatrix} p_{n+1} \\ q_{n+1} \end{pmatrix}_{Euler} = -\frac{1}{2} \begin{pmatrix} p_n \\ q_n \end{pmatrix} \Delta t^2 + O(\Delta t^3)$$

調和振動子なので n ステップでのエネルギー E_n は

$$E_n = \frac{1}{2}(p_n^2 + q_n^2) = \frac{1}{2}(p_n, q_n) \begin{pmatrix} p_n \\ q_n \end{pmatrix}$$

で与えられる。したがって、$n+1$ ステップ目のエネルギーは

$$E_{n+1} \quad = \tfrac{1}{2}(p_{n+1}, q_{n+1}) \begin{pmatrix} p_{n+1} \\ q_{n+1} \end{pmatrix} = \tfrac{1}{2}(p_n, q_n) T_0^t T_0 \begin{pmatrix} p_n \\ q_n \end{pmatrix}$$

$$
\begin{aligned}
&= \tfrac{1}{2}(p_n, q_n)\begin{pmatrix} 1+\Delta t^2 & 0 \\ 0 & 1+\Delta t^2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} p_n \\ q_n \end{pmatrix} \\
&= \tfrac{1}{2}(p_n^2+q_n^2)(1+\Delta t^2) = E_n(1+\Delta t^2)
\end{aligned}
$$

となり、1 ステップではエネルギー保存が $O(\Delta t)$ までなりたっているが、時間を進めていくと、エネルギーが指数関数的に単調増加することがわかる

2　2 次の Runge-Kutta 法

この場合、(p_n, q_n) を 1 ステップ進める時間発展行列は簡単作れて

$$
T = \begin{pmatrix} 1-\frac{\Delta t^2}{2} & -\Delta t \\ \Delta t & 1-\frac{\Delta t^2}{2} \end{pmatrix}
$$

前と同様にして $n+1$ ステップ目のエネルギーは

$$
E_{n+1} = \frac{1}{2}(p_n, q_n)T^t T\begin{pmatrix} p_n \\ q_n \end{pmatrix} = E_n(1+\frac{\Delta t^4}{4})
$$

したがって、今度は 1 ステップでのエネルギー保存が $O(\Delta t^3)$ までなりたっているが、時間を進めていくと、やはりエネルギーが指数関数的に単調増加する

3　4 次の Runge-Kutta 法

よく使われる方法なので、時間発展行列の導出を少し詳しく書いておく。

$$
\left\{
\begin{aligned}
\vec{k_1} &= \Delta t T_0\begin{pmatrix} p_n \\ q_n \end{pmatrix} \\
\vec{k_2} &= \Delta t T_0\left[\begin{pmatrix} p_n \\ q_n \end{pmatrix} + \frac{\vec{k_1}}{2}\right] \\
\vec{k_3} &= \Delta t T_0\left[\begin{pmatrix} p_n \\ q_n \end{pmatrix} + \frac{\vec{k_2}}{2}\right] \\
\vec{k_4} &= \Delta t T_0\left[\begin{pmatrix} p_n \\ q_n \end{pmatrix} + \vec{k_3}\right]
\end{aligned}
\right.
$$

を使って

$$
\begin{aligned}
\begin{pmatrix} p_{n+1} \\ q_{n+1} \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} p_n \\ q_n \end{pmatrix} + \frac{\vec{k_1}}{6} + \frac{\vec{k_2}}{3} + \frac{\vec{k_3}}{3} + \frac{\vec{k_4}}{6} \\
&= \begin{pmatrix} 1-\frac{\Delta t^2}{2}+\frac{\Delta t^4}{24} & -\Delta t+\frac{\Delta t^3}{6} \\ \Delta t-\frac{\Delta t^3}{6} & 1-\frac{\Delta t^2}{2}+\frac{\Delta t^4}{24} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} p_n \\ q_n \end{pmatrix}
\end{aligned}
$$

したがって、時間発展行列は

$$T = \begin{pmatrix} 1 - \frac{\Delta t^2}{2} + \frac{\Delta t^4}{24} & -\Delta t + \frac{\Delta t^3}{6} \\ \Delta t - \frac{\Delta t^3}{6} & 1 - \frac{\Delta t^2}{2} + \frac{\Delta t^4}{24} \end{pmatrix}$$

前と同様にして $n+1$ ステップ目のエネルギーは

$$E_{n+1} = \frac{1}{2}(p_n, q_n)T^t T \begin{pmatrix} p_n \\ q_n \end{pmatrix} = E_n(1 - \frac{\Delta t^6}{72} + \frac{\Delta t^8}{576})$$

したがって、1 ステップでのエネルギー保存が $O(\Delta t^5)$ までなりたっているが、時間を進めていくと、今度はエネルギーが指数関数的に単調減少する

4　最低次の symplectic integrator

Euler 差分を変更して、運動量の時間発展と座標の時間発展を

$$\begin{pmatrix} p_{n+1} \\ q_{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & -\Delta t \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \Delta t & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p_n \\ q_n \end{pmatrix} \equiv T_2 T_1 \begin{pmatrix} p_n \\ q_n \end{pmatrix}$$

の 2 ステップに分けて計算する。すると、1 ステップ分の時間発展行列は

$$T = T_2 T_1 = \begin{pmatrix} 1 - \Delta t^2 & -\Delta t \\ \Delta t & 1 \end{pmatrix}$$

運動量と座標の時間発展が対称ではないことに注意。1 ステップで生じる誤差は

$$\begin{pmatrix} p_{n+1} \\ q_{n+1} \end{pmatrix}_{true} - \begin{pmatrix} p_{n+1} \\ q_{n+1} \end{pmatrix}_{symp} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} p_n \\ -q_n \end{pmatrix} \Delta t^2 + O(\Delta t^3)$$

となり、計算精度としては Euler 差分と同様に $O(\Delta t)$ まで、また $O(\Delta t^2)$ で現れる誤差項の絶対値は Euler 差分と同じである。

$n+1$ ステップ目のエネルギーは

$$\begin{aligned} E_{n+1} &= \tfrac{1}{2}(p_n, q_n) T_1^t T_2^t T_2 T_1 \begin{pmatrix} p_n \\ q_n \end{pmatrix} \\ &= \tfrac{1}{2}(p_n, q_n) \begin{pmatrix} 1 - \Delta t^2 + \Delta t^4 & \Delta t^3 \\ \Delta t^3 & 1 + \Delta t^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p_n \\ q_n \end{pmatrix} \\ &= E_n - \tfrac{1}{2}(p_n^2 - q_n^2)\Delta t^2 + 2 p_n q_n \Delta t^3 + \tfrac{1}{2} p_n^2 \Delta t^4 \end{aligned}$$

となり、エネルギー保存は $O(\Delta t)$ までなりたっている。ところが、ここまでの式から今の場合には

$$E_{n+1} + \frac{1}{2} p_{n+1} q_{n+1} \Delta t = E_n + \frac{1}{2} p_n q_n \Delta t$$

であることが確かめられる。したがって、エネルギー自体は保存量になっていないが、エネルギーに $pq\Delta t/2$ を加えたものが保存量になっている。調和振動子なので、$pq\Delta t$ は振動し、特に振動子の半周期ごとに 0 になる。