

## 区分的に滑らかなハミルトン系に対する構造保存型数値解法

48096206 榎本 翔

指導教員 松尾宇泰 准教授

2011年2月1日

## 1 はじめに

定義 1.1  $\mathbb{R}^{2N}$  値関数  $z(t) = [q(t); p(t)]$  ( $q(t), p(t) \in \mathbb{R}^N, N \in \mathbb{N}$ ) を未知数とする方程式を考える.  $\mathbb{R}^{2N}$  上定義された滑らかな関数  $H(q, p)$  を用いて,

$$\frac{dq_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \quad \frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \quad (i = 1, 2, \dots, N)$$

と表される方程式をハミルトン系, 関数  $H(q, p)$  をハミルトニアンと言う.

滑らかなハミルトン系の構造保存型数値解法の研究は以前から活発になされていたが, 近年はそれをより複雑な区分的に滑らかなハミルトン系へ適用する研究も注目されつつある. 今回はその一つである, 以下の剛体球の多体問題において弾性衝突が生じる場合のハミルトン系を扱う.

定義 1.2  $N$  個の剛体球が滑らかなポテンシャル場  $V(q)$  のもとで相互作用 (弾性衝突) する時, 今回考える系は

$$H(q, p) = T(p) + V(q), \quad T(p) = \frac{1}{2} p^T M^{-1} p$$

$$d(q_i, q_j) \geq r_i + r_j, \quad \forall i \neq j, \quad i, j \in 1, \dots, N$$

となる. ここで,  $q_i$  は  $i$  番目の剛体球の位置ベクトル,  $r_i$  は  $i$  番目の剛体球の半径,  $d(q_i, q_j)$  は  $i$  番目と  $j$  番目の剛体球の距離を表し, 一般的なユークリッドノルムを用いて

$$d(q_i, q_j) = \|q_i - q_j\|_2$$

で与えられる [1].

## 2 既存手法

今回考える問題に対する既存手法は全てシンプレクティック法に基づいている. シンプレクティック法とは滑らかなハミルトン系専用の数値解法であり, ハミルトン系の時間発

展のシンプレクティック性 (面積保存性) を保持する. 以下によく使用される二次の解法のシュテルマー・ベルレ法を記す.

アルゴリズム 2.1  $\Delta t$  を時間刻み幅とする時,

$$p^{n+\frac{1}{2}} = p^n + \frac{\Delta t}{2} \nabla V(q^n) \quad (p \text{ ステップ } 1),$$

$$q^{n+1} = q^n + \Delta t \nabla T(p^{n+\frac{1}{2}}) \quad (q \text{ ステップ}),$$

$$p^{n+1} = p^{n+\frac{1}{2}} + \frac{\Delta t}{2} \nabla V(q^{n+1}) \quad (p \text{ ステップ } 2).$$

今回考える系にシュテルマー・ベルレ法を使用する場合, 衝突処理を途中で組み込まなければならない. ここで, 衝突は  $q$  ステップでのみ起こり得るので ( $p$  ステップでは剛体球は移動せず速度の変化のみが起こるため),  $q$  ステップのみ分割して 2 ステップに分け, 衝突処理 (運動量交換) をすればよい. この手法は Primitive Splitting Algorithm (PSA) と呼ばれている [4].

PSA はそれなりに動作するが, 一部のステップの分割により, 全体の精度が一次に低下してしまう. この改善策として, ステップ中での衝突処理を回避し, 前後の  $p$  ステップもまとめて分割する手法 (可変ステップの導入と等価) が提案されており, Collision Verlet Algorithm (CVA) と呼ばれている [2].

なお, シンプレクティック解法の利点の一つとして, 元のハミルトニアンと非常に近い, 無限級数の形で存在する影のハミルトニアンを厳密に保存するという性質が知られている. しかし, 可変ステップを用いる事でこの性質は失われるため, CVA ではこの利点を生かせない. そこで, CVA に補正をかけ, 影のハミルトニアンを二次の項まで保存するように変更した手法が提案されており, Modified Collision Verlet Algorithm (MCVA) と呼ばれている [1].

ただし, MCVA は手順が非常に複雑 (原論文でも曖昧) で, さらに計算も重くなるという欠点を持つ.

### 3 提案手法

一方、滑らかなハミルトン系の数値解法には、理論上ハミルトニアンを厳密に保存する離散変分法に基づくエネルギー保存解法が存在する。さらに、その性質は可変ステップの下でも壊れない事が知られている [3]。そこで今回は CVA を改良し、各ステップを可変ステップのエネルギー保存解法で進め、衝突を各ステップ間で処理する Collision Discrete Derivative Algorithm (CDDA) を提案する。この手法は既存手法よりもはるかに高いエネルギー保存精度を保持すると期待される。

### 4 数値実験

各手法の比較のため、二つの数値実験を行った。

まず [1] の追実験も兼ねて、五つの剛体球を硬い箱の中で直線に並べ、隣接球同士をばねでつないだ二次元モデルを考える。二番目と四番目の球にランダムな初速度を与え、入力固定ステップ幅を 0.3 ~ 0.001 の間で変化させ、各々 5000 回反復させた。このとき、入力固定ステップ幅に対する各手法のハミルトニアンの誤差の最大値をプロットしたものを図 1 に示す。ただし、真値として 1 ステップ目終了後の値を用いた。

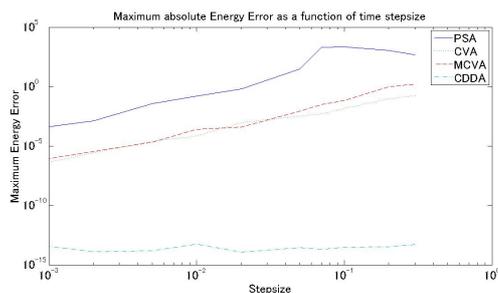


図 1: ハミルトニアンの誤差の最大値

図 1 より、提案手法が入力固定ステップ幅と関係なく最も高い精度を保持しているのが分かる。その他は PSA が一次、CVA と MCVA が二次の精度で差はほとんど見られなかった。

次に九つの剛体球を硬い箱の中で格子状に並べ、各球同士に万有引力が働く二次元モデルを考える。真ん中の球以外に真ん中に向か

う方向の初速度を与え、その他はばねの時と同じ条件で実験を行った。結果を図 2 に示す。

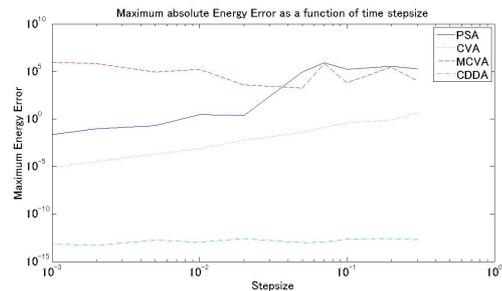


図 2: ハミルトニアンの誤差の最大値

図 2 より、この時も提案手法が最も精度が良いことが分かる。

### 5 結論

高精度のハミルトニアン保存解法を提案し、数値実験により検証した。ただし計算が重いため、計算量の削減等が今後の課題である。

### 参考文献

- [1] S. D. Bond and B. J. Leimkuhler: Stabilized Integration of Hamiltonian Systems with Hard-Sphere Inequality Constraints. *SIAM Journal on Scientific Computing*, Vol. 30 (2007), pp. 134–147.
- [2] Y. A. Houndonougbo, B. B. Laird and B. J. Leimkuhler: A molecular dynamics algorithm for mixed hard-core/continuous potentials. *Molecular Physics*, Vol. 98 (2000), pp. 309–316.
- [3] T. Matsuo: High-order schemes for conservative or dissipative systems. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, Vol. 152 (2003), pp.305–317.
- [4] S. -H. Suh, L. Mier-Y-Teran, H. S. White and H. T. Davis: Molecular dynamics study of the primitive model of 1-3 electrolyte solutions. *Chemical Physics*, Vol. 142 (1990), pp. 203–211.