保存則に即した数値計算手法

ー構造保存数値解法の背景・考え方・近年の進展ー

宮武 勇登（名古屋大学）

研究会
「計算物質科学における時空間アップスケーリングと数理手法」

目次

目次

Störmer (天文学)

ODE $\dot{y} = f(y)$ の数値解法

Euler法，Runge–Kutta法，線形多段解法...(19世紀から研究)

$\to$ 実際のapplicationではしばしば不安定

Störmer (1907)

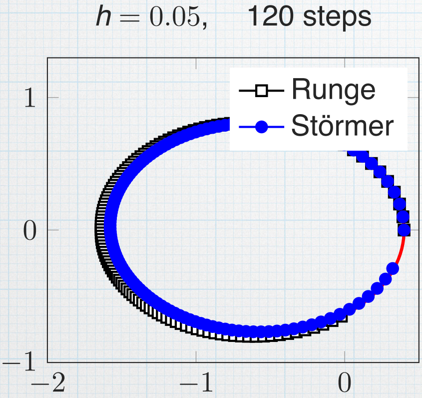
$$\ddot{q} = -\nabla V(q) \quad \Leftrightarrow \quad \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\begin{bmatrix} q \\ p \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} p \\ -\nabla V(q) \end{bmatrix}$$

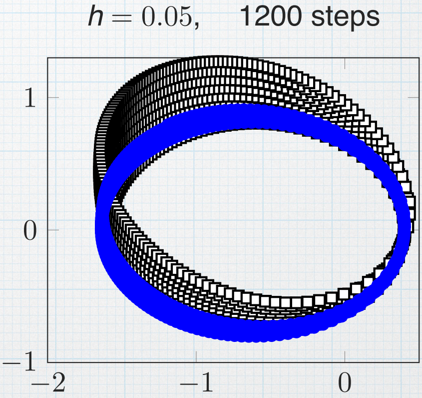
Störmer法の時間発展アルゴリズム：$(q_n, p_n) \mapsto (q_{n+1}, p_{n+1})$

$$\begin{aligned} q_{n+1/2} &= q_n + \frac{h}{2} p_n \\ p_{n+1} &= p_n - h \nabla V(q_{n+1/2}) \\ q_{n+1} &= q_{n+1/2} + \frac{h}{2} p_{n+1} \end{aligned}$$

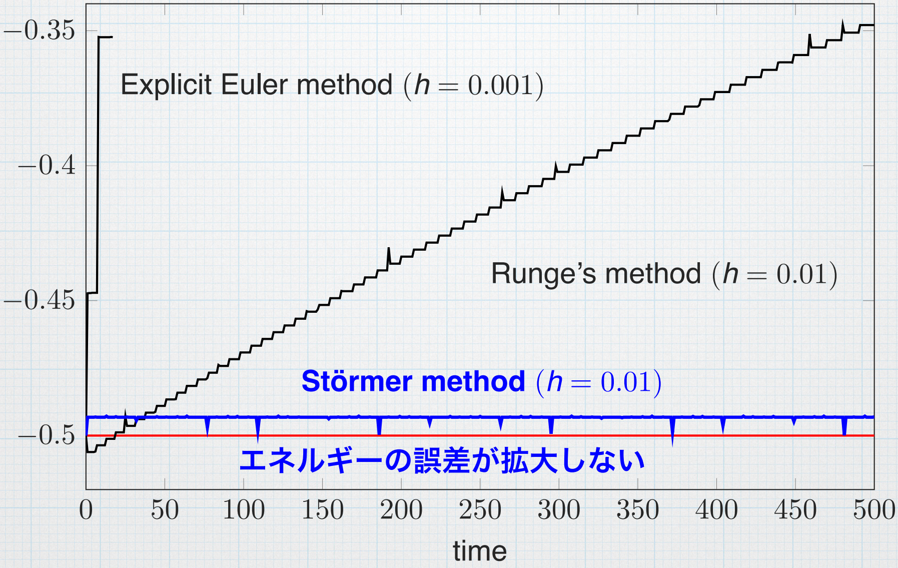
Kepler問題：数値解の時間発展

Keplerの二体問題（厳密解は楕円軌道）に対して，
Rungeの方法 と **Störmer法** を比較



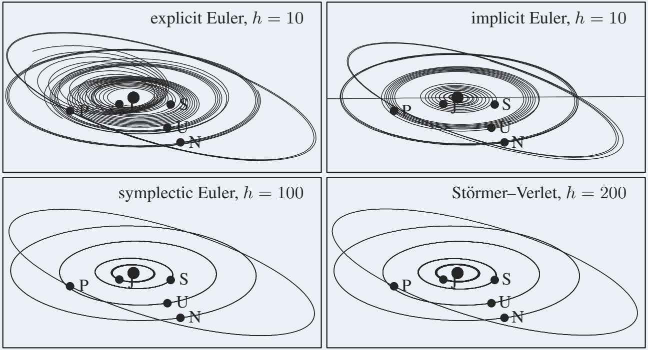


Kepler問題：エネルギーの時間発展



天体シミュレーションへの応用

Outer solar system



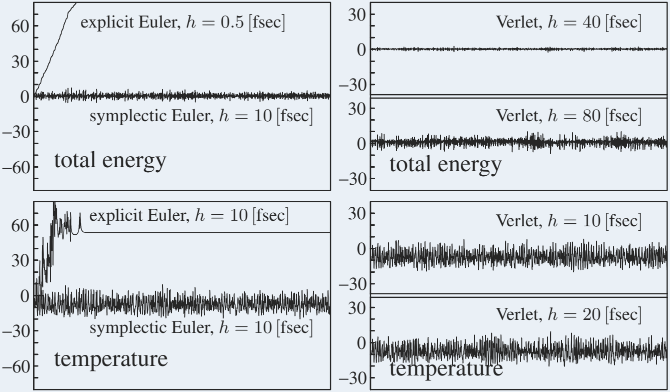
(from Hairer, Lubich, and Wanner, 2006)

60年後...分子動力学分野にて

Verlet (1967)

Verlet法	=	Störmer法	=	Störmer–Verlet法
(分子動力学)		(天文学)		(数値解析学)

分子動力学（argon crystal）



(from Hairer, Lubich, and Wanner, 2006)

汎用解法? 専用解法?

- **Störmer–Verlet法は汎用解法？**
  $\to$ NO （任意のODEには適用できない）
- **Störmer–Verlet法は専用解法？**
  $\to$ 開発当初は.
  但し，次のタイプのHamilton系であれば分野を問わず適用可能

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\begin{bmatrix} q \\ p \end{bmatrix} = J\nabla H(q,p), \quad H(q,p) = T(p) + U(q), \quad J = \begin{bmatrix} 0 & I \\ -I & 0 \end{bmatrix}$$

SV法は（separableな）Hamilton系に対して汎用解法を凌ぐ

$\because$ Hamilton系のsymplectic性を厳密に再現している

構造保存（幾何学的）数値解法

理論 ⟷ **応用**

汎用解法
(e.g. Runge–Kutta法)

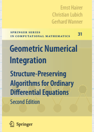
構造保存数値解法

専用解法
(e.g. Störmer法)

構造保存数値解法 (1980年代〜)

- **対象の微分方程式クラスを限定**
  例：Hamilton系，勾配系
- **何らかの性質・構造を再現するように数値解法を設計**
  例：(Hamilton系の) symplectic性，エネルギー保存性

  → その分，汎用解法より優れている（ことが期待される）
- Störmer–Verlet法は構造保存数値解法の一種 (symplectic解法)



<u>定番教科書 (の一つ)</u>

Hairer, Wanner, Lubich: Geometric Numerical Integration, 2006.

目次

Hamilton系のsymplectic性

Hamilton系

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}y = J\nabla H(y), \quad y(t_0) = y_0 \in \mathbb{R}^{2d} \quad \left(J = \begin{bmatrix} 0 & I \\ -I & 0 \end{bmatrix} \right)$$

定理 (symplectic性)

Hamilton系のフロー $\phi_{\Delta t} : \mathbb{R}^{2d} \ni y(t) \mapsto y(t + \Delta t) \in \mathbb{R}^{2d}$ は symplectic写像

$$\left(\frac{\partial \phi_{\Delta t}}{\partial y} \right)^{\top} J^{-1} \left(\frac{\partial \phi_{\Delta t}}{\partial y} \right) = J^{-1}.$$

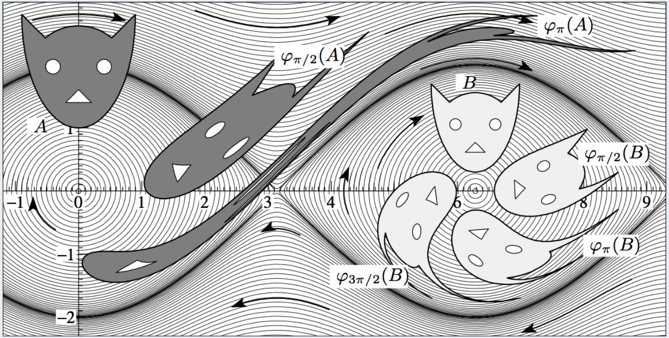
【同値な表現 (微分形式)】
$y = (q, p)^{\top}$ と分けたとき，$\mathrm{d}q \wedge \mathrm{d}p = \mathrm{const.}$

Symplectic数値解法

symplectic数値解法

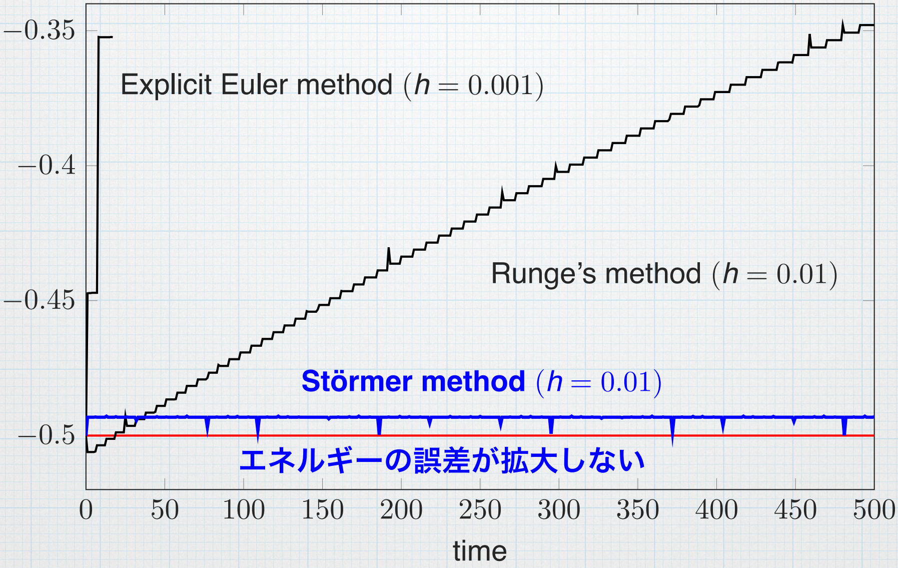
離散時間発展写像$y_n \mapsto y_{n+1}$がsymplecticとなる数値解法

（例）中点則，**Störmer–Verlet法**，Gauss–Runge–Kutta法
（NLS方程式に対する）splitting解法



(from Hairer, Lubich, and Wanner, 2006)

再掲：Kepler問題のエネルギーの時間発展

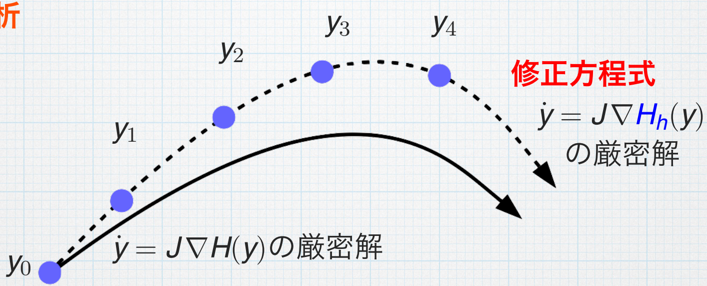


なぜ定性的に良い数値解が得られるのか？

数値実験の考察

　エネルギーの誤差がバウンドされている（拡大しない）

後退誤差解析



p 次のsymplectic解法に対して，　$H_h(y) = H(y) + h^p H_p(y) + \cdots$

$$\therefore \quad H(y_n) = H(y_0) + \mathcal{O}(h^p)$$

良い長時間挙動の本質

Symplectic解法はハミルトン系をハミルトン系で近似

cf. HLW 06: Chap. IX.3, Theorem 3.1

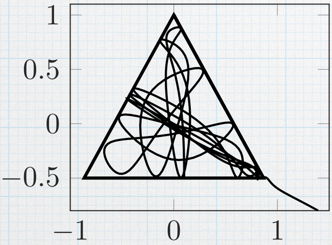
Hamilton系に対するその他の構造保存数値解法

Hamilton系 $\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}y = J\nabla H(y)$ の他の性質

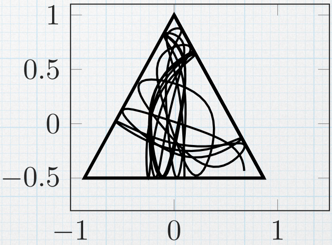
- エネルギー保存性 $H(y) = \mathrm{const.} \to$ **エネルギー保存解法**

（例）Hénon–Heiles系（エネルギーの僅かなズレが致命的）

Symplectic Euler method



Average vector field method



並列エネルギー保存解法（M.–Butcher, SIAM J. Numer. Amal. [2006]）
（NLS方程式に対して性能評価: 山本先生，星先生，井町さん，工藤さん）

- 体積保存性 $\to$ **体積保存解法**

複数の性質を再現できないだろうか？

symplectic性 ＋ エネルギー保存性？

特殊ケースを除いて**不可能**

(Zhong–Marsden, Phys. Lett. A [1988], Chartier et al., Numer. Math. [2006])

∵もし可能ならば，解軌道を厳密に再現できる

→ conjugate/pseudo symplectic解法
(symplectic性の制約を少し弱めた解法)

複数の保存量を再現？

ODE

Minesaki–Nakamura (Phys. Lett. A [2002]),
Dahlby–Owren–Yaguchi (J. Phys. A [2011])

PDE

McLaren–M.–Quispel 2016

目次

精度を上げるには？

例えばStörmer–Verlet法は2次精度解法
　　$\to$ 高精度化できないか？

$\Phi_h : \mathbb{R}^N \to \mathbb{R}^N$ ：1ステップ後の数値解を返す写像（symplectic解法）

合成解法 (composition method)：写像の合成

$$\Psi_h := \Phi_{\gamma_s h} \circ \cdots \circ \Phi_{\gamma_1 h} \qquad (\gamma_1 + \cdots + \gamma_s = 1)$$

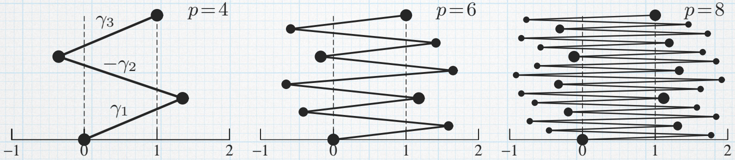
例：$\Psi_h = \Phi_{\frac{1}{2}h} \circ \Phi_{\frac{1}{2}h}$ （刻み幅を半分にしただけ・次数は同じ）
　　$0 < \gamma_i < 1$とすれば，Φ_hよりもΨ_hの方が数値解の誤差は小さい

やりたいこと

Find $\gamma_1, \dots, \gamma_s$,
s.t. Ψ_hの次数 $>$ Φ_hの次数, Ψ_hもsymplectic解法

Yoshidaのtriple jump, Suzukiのfractal

Yoshidaのtriple jump (Yoshida, Phys. Lett. A [1990])

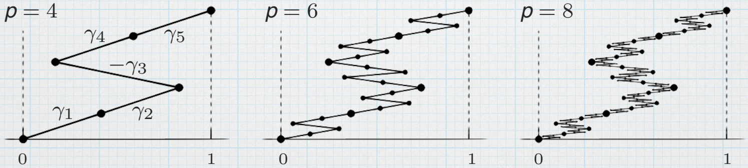


(Hairer–Lubich–Wanner 2006より抜粋)

問題点：大きな負の刻み幅を含む

（分子動力学や勾配系の数値計算で問題）

Suzukiのfractal (Suzuki, Phys. Lett. A [1990])

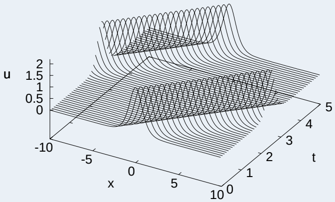


PDE版 構造保存数値解法

浅水波を記述するKdV方程式：

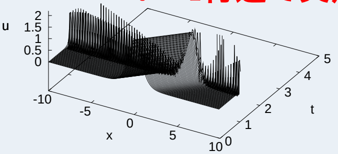
$$\frac{\partial u}{\partial t} + 6u\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} = 0, \quad x \in \mathbb{T}, \ t > 0.$$

エネルギー保存則：$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\mathcal{H}[u] = 0, \quad \mathcal{H}[u] := \int_{\mathbb{T}} \left(u^3 - \frac{u_x^2}{2} \right) \mathrm{d}x$



エネルギー保存スキーム
(Furihata 1999)
$\Delta x = 0.1, \Delta t = 1/10$

$t = 1$付近で突然不安定



4次のRunge–Kuttaスキーム
(空間離散化は左と同じ)
$\Delta x = 0.1, \Delta t = 1/915$

離散変分法

変分構造を持つPDE

$$u_t = \mathcal{D}\frac{\delta \mathcal{H}}{\delta u}, \quad \mathcal{H}[u] = \int H(u, u_x, \dots)\,\mathrm{d}x$$

- $\mathcal{D}$: 歪対称 $\Rightarrow$ エネルギー保存則 $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\mathcal{H} = 0$
  （例）KdV, Nonlinear Schrödinger, Klein–Gordon
- $\mathcal{D}$: 半不定値 $\Rightarrow$ エネルギー散逸則 $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\mathcal{H} \leq 0$
  （例）Heat, Allen—Cahn, Cahn–Hilliard, Ginzburg–Landau

離散変分法（1990年代中頃〜）

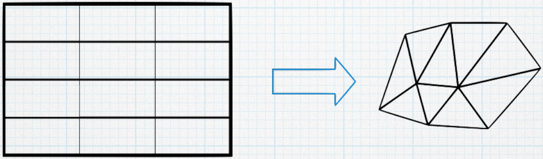
変分構造を持つPDEに対して保存型/散逸型スキームを導出する手法

- 降籏–森により提案
- 日本を中心に発展（→次スライド）

離散変分法の近年の発展

高次元問題への対応

従来の離散変分法：差分法，等間隔メッシュにのみ対応
→複雑な多次元領域を扱うため，**不等間隔メッシュ**を導入



- **有限要素法** (Matsuo [2008])
  離散変分法よりも適用範囲が狭い
  → 種々の制約の解除，不連続Galerkin法への拡張（高精度化）
  (M.–Matsuo [2014]等)
- **mapping methods** (Yaguchi et al. [2010] 等)

目次

今後の展望

大規模問題の需要・構造保存数値解法の多くは陰解法

- 並列計算・並列性のある数値解法の開発
- モデル縮減（データの利用・方程式のサイズを小さく）
  （→ 本日の松尾先生のご講演）

個人的興味

応用分野で

- 優れた/よく使われている「専用解法」
- 数値解法の性能を評価する物理/数理的指標
- 必ずしもきれいな構造を持たない（けれど重要な）方程式/問題

その他

- 確率微分方程式・非整数階微分方程式
- 数値線形代数との連携
- データ同化などへの応用の可能性