

# シミュレーション工学

## 分子動力学法(1)理論的背景と数値積分

慶應義塾大学大学院理工学研究科基礎理工学専攻物理情報専修

渡辺宙志

# はじめに

## 分子動力学法とは

- 原子や分子にかかる「力」を計算し、位置を更新していく数値計算手法
- 背景にある理論は解析力学

## 本講義の目的

- 解析力学の復習
- 分子動力学法の時間発展アルゴリズム

# ニュートンの運動方程式

$$ma = F$$

物体の加速度は力に比例する  
物体の動きにくさは質量に比例する

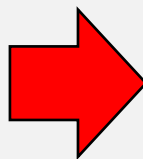
# ニュートンの運動方程式

$$a = \frac{dv}{dt}$$

加速度とは速度の時間変化率

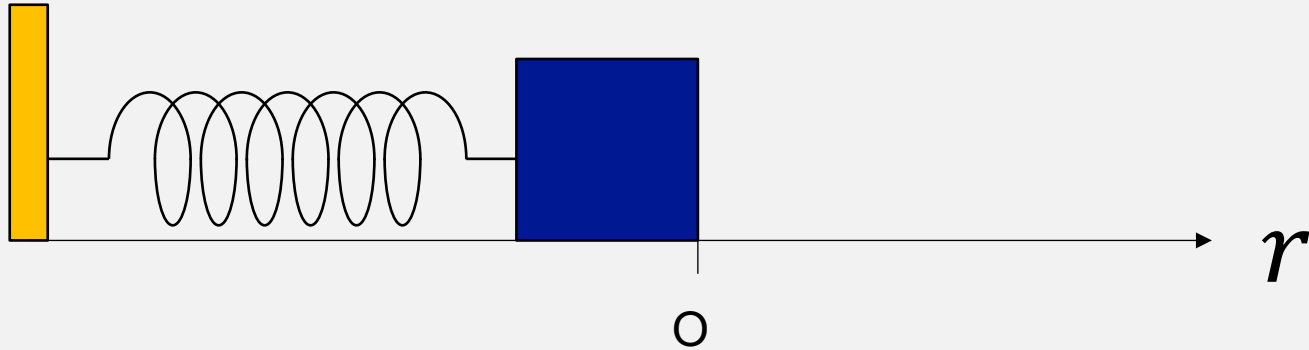
$$v = \frac{dr}{dt}$$

速度とは位置の時間変化率


$$\frac{d^2r}{dt^2} = \frac{F}{m}$$

運動方程式は  
位置の二階微分方程式

# 調和振動子



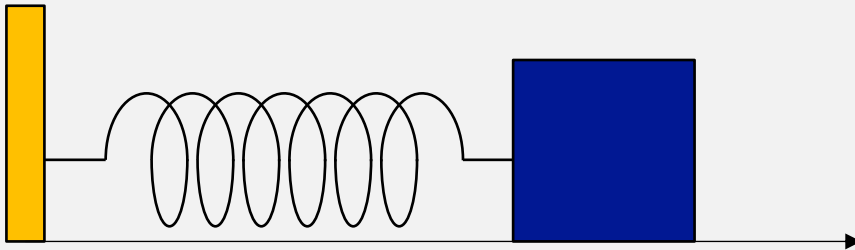
自然長の位置を原点にとる  
質量とバネ定数は1とする

$$\frac{d^2 r}{dt^2} = -r$$

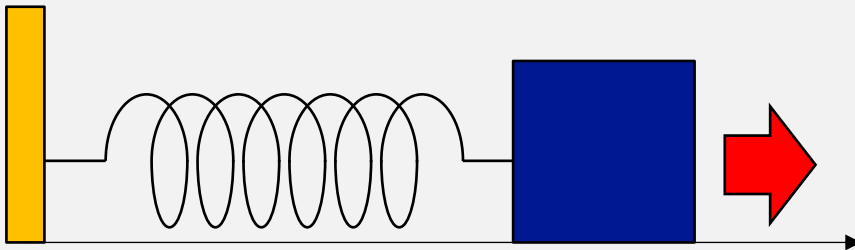
# 調和振動子

$r = 0$  物体が原点にいる

これだけでは系の状態が定まらない



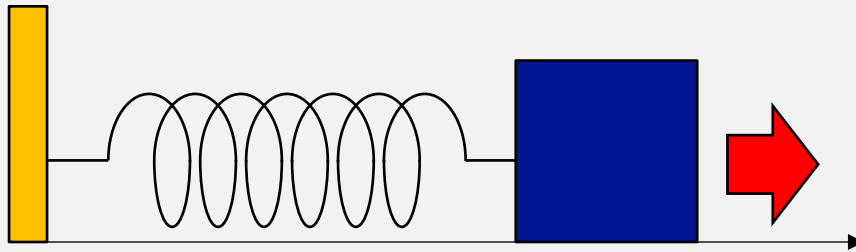
止まった状態かもしれない



運動中にちょうど原点を  
通過したところかもしれない

# 調和振動子

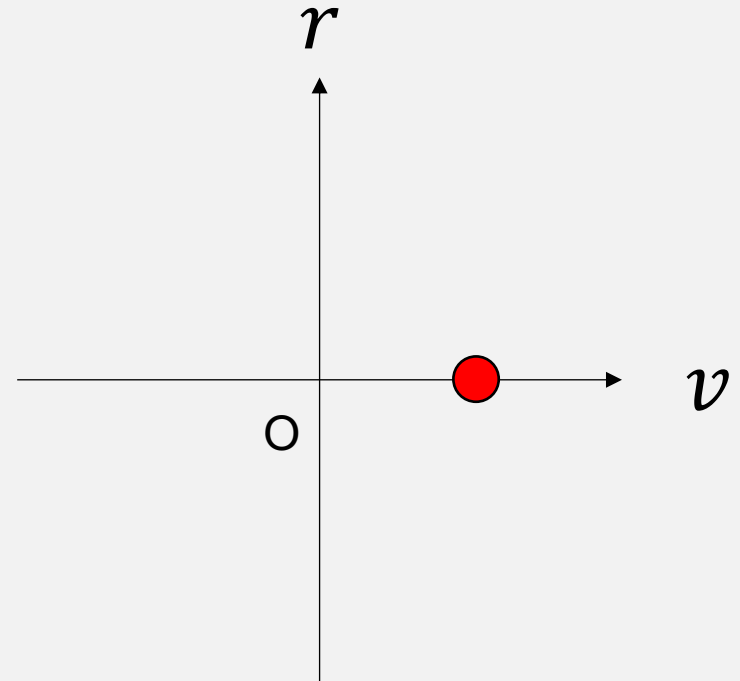
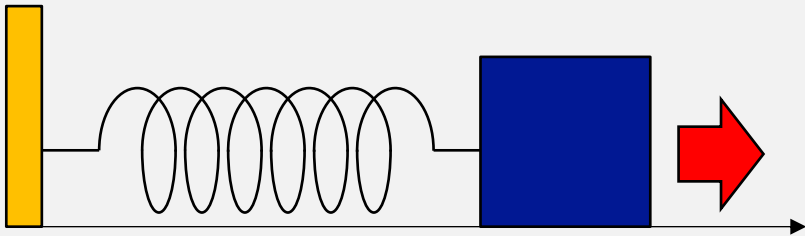
$r = 0, v = 1$  物体が原点にいて、速度が1



$$\frac{d^2 r}{dt^2} = -r$$

二階の常微分方程式で初期条件を二つ与えたので、  
この系の運動は完全に定まる

# 位相空間



$$(v, r) = (1, 0)$$

この系の状態は $(v, r)$ 空間の点を指定することで一意に定まる  
この空間を**位相空間(Phase Space)**と呼ぶ



# 位相空間

系の状態は $(v, r)$ 空間で指定できるのだから  
運動方程式も $(v, r)$ で書きたい

$$\frac{d^2 r}{dt^2} = -r \quad \rightarrow \quad \begin{aligned} \frac{dv}{dt} &= -r \\ \frac{dr}{dt} &= v \end{aligned}$$

二階の常微分方程式を一階の連立常微分方程式に

# 力学系

$$\frac{dv}{dt} = -r$$

変数の組  $(v, r)$  の時間微分  $(\dot{v}, \dot{r})$  が  $(v, r)$  の関数として書けている

$$\frac{dr}{dt} = v$$

一般的に書くと

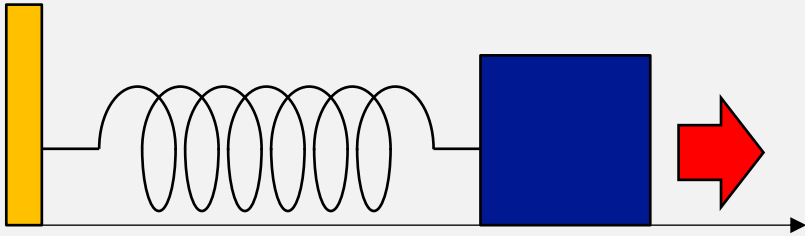
$$\begin{aligned}\frac{dv}{dt} &= f_v(r, v) & f_v(r, v) &= -r \\ \frac{dr}{dt} &= f_r(r, v) & f_r(r, v) &= v\end{aligned}$$

このような系を**力学系**(dynamical system)と呼ぶ

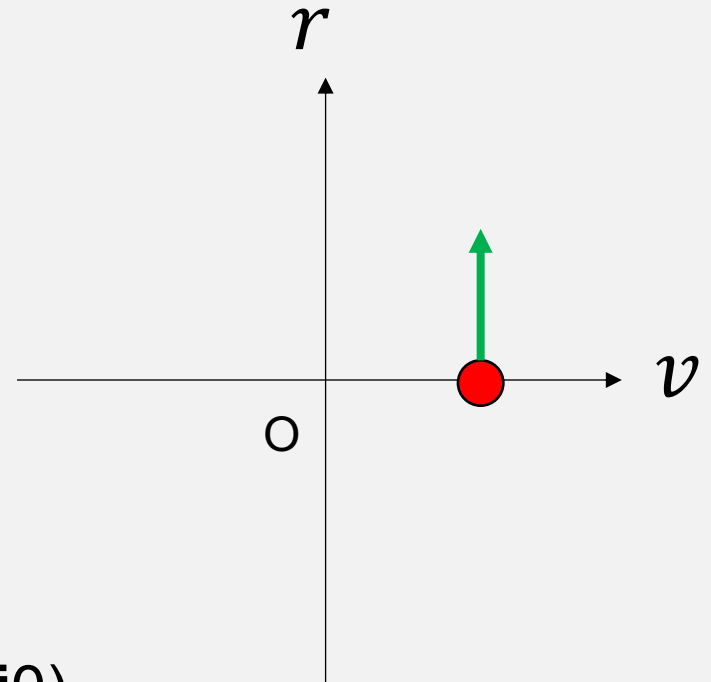
※運動方程式は力学系的一种

# 位相空間と流れ

現在の状態(原点で右向きに運動)



$$(v, r) = (1, 0)$$



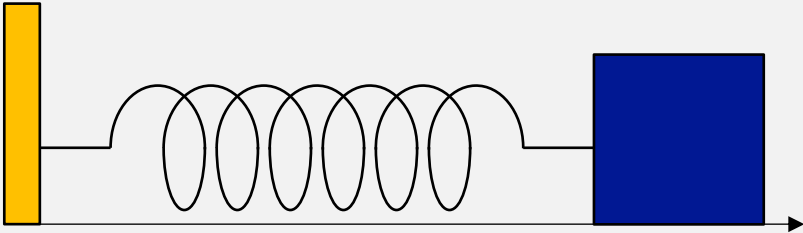
時間微分(右向きに運動し、加速度0)

$$(\dot{v}, \dot{r}) = (0, 1)$$

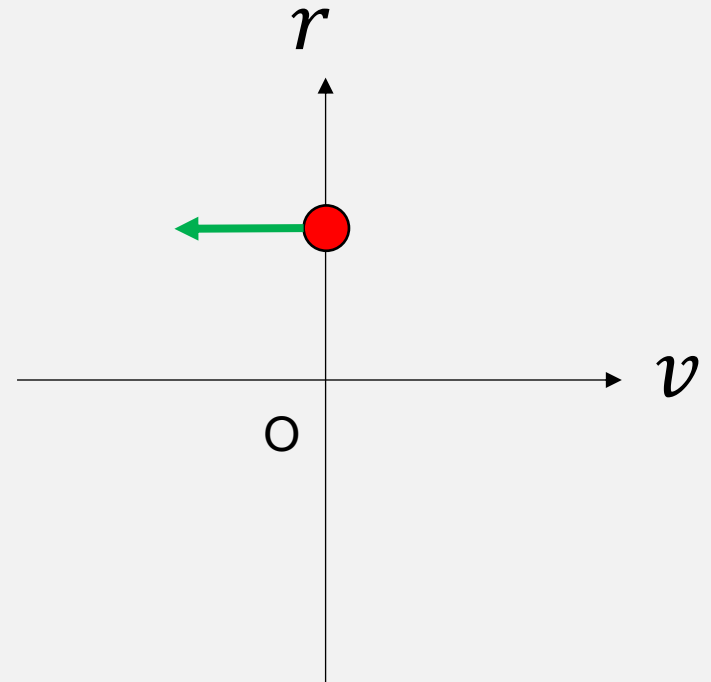
$$(\dot{v}, \dot{r}) = (-r, v)$$

# 位相空間と流れ

現在の状態(バネが伸び切って停止)



$$(v, r) = (0, 1)$$



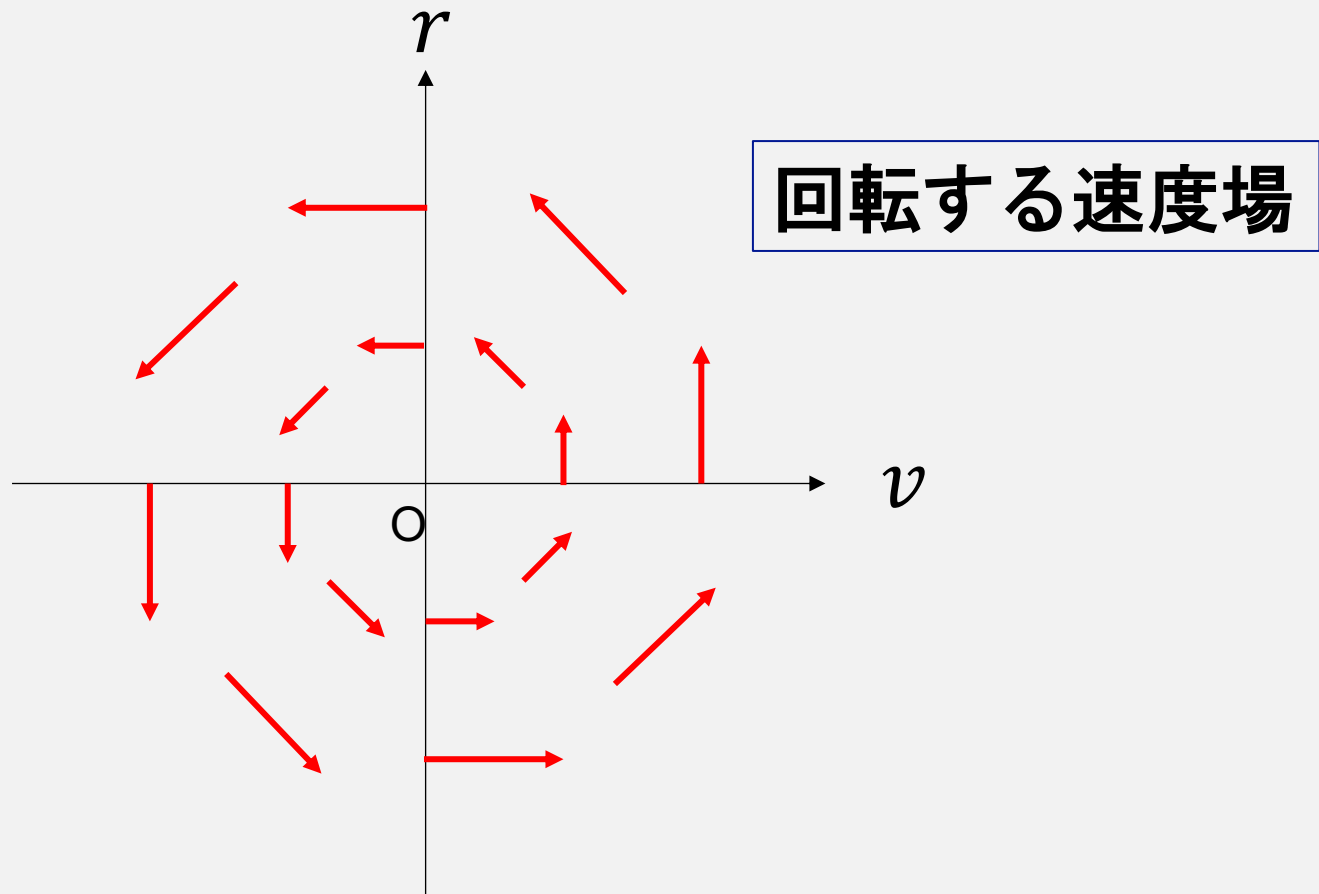
時間微分(左向きに加速し、速度0)

$$(\dot{v}, \dot{r}) = (-1, 0)$$

$$(\dot{v}, \dot{r}) = (-r, v)$$

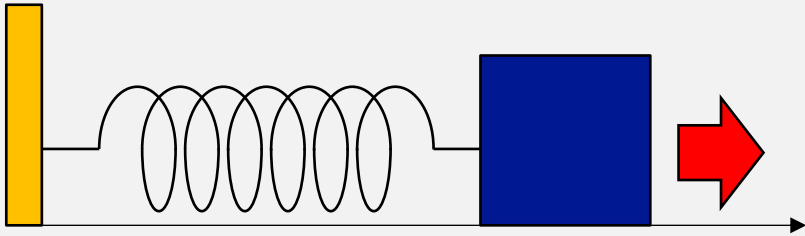
# 位相空間と流れ

今の手続きを様々な点で繰り返すと・・・

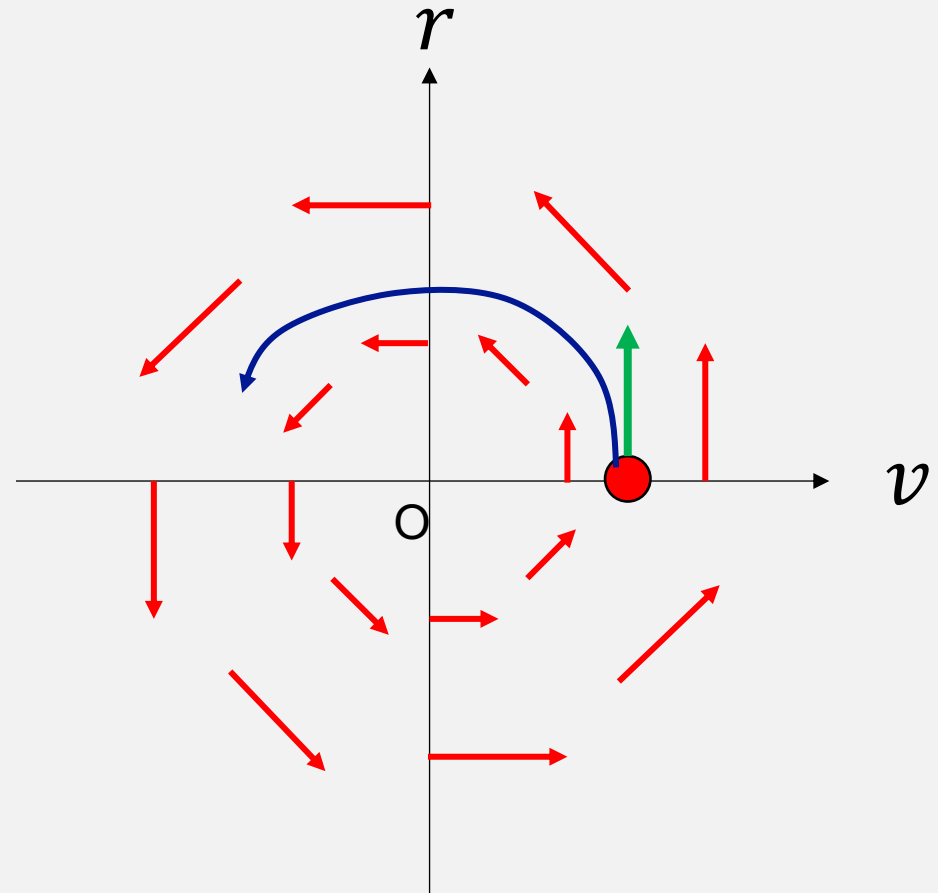


運動方程式は位相空間にベクトル場を定義する

# 位相空間と流れ



$$(v, r) = (1, 0)$$



初期条件：位相空間にトレーサーを置くこと  
方程式の解：トレーサーの軌跡

# 位相空間のまとめ

- 運動方程式に従う系の状態を一意に決めることができる空間を**位相空間**と呼ぶ
- 運動方程式とは、位相空間に**ベクトル場 (速度場)**を定義するものである
- 系の状態は、位相空間上の一点で表現できる
- 系の運動は、位相空間上の軌跡で表現され、運動方程式が定義した速度場に従って動く点の軌跡である

# 変分原理

3次元空間に $N$ 粒子がいる場合、その位相空間は $6N$ 次元  
(位置が3成分、速度が3成分で粒子あたり6成分)

$$\underbrace{(r_x^1, r_y^1, r_z^1, \dots, r_x^N, r_y^N, r_z^N, v_x^1, v_y^1, v_z^1, \dots, v_x^N, v_y^N, v_z^N)}_{6N}$$

$6N$ 次元の空間にベクトル場を定義するには、 $6N$ 本の関数が必要

$$\left. \begin{aligned} \frac{dr_x^1}{dt} &= f_1(r_x^1, r_y^1, r_z^1, \dots, r_x^N, r_y^N, r_z^N, v_x^1, v_y^1, v_z^1, \dots, v_x^N, v_y^N, v_z^N) \\ &\vdots \\ \frac{dv_z^N}{dt} &= f_{6N}(r_x^1, r_y^1, r_z^1, \dots, r_x^N, r_y^N, r_z^N, v_x^1, v_y^1, v_z^1, \dots, v_x^N, v_y^N, v_z^N) \end{aligned} \right\} 6N$$



# 変分原理

ラグランジアンというスカラー関数ひとつから、運動方程式に必要な $6N$ 本の方程式を生み出すことができる

$$\mathcal{L}(r_x^1, r_y^1, r_z^1, \dots, r_x^N, r_y^N, r_z^N, v_x^1, v_y^1, v_z^1, \dots, v_x^N, v_y^N, v_z^N)$$



$$\left. \begin{aligned} \frac{dr_x^1}{dt} &= f_1(r_x^1, r_y^1, r_z^1, \dots, r_x^N, r_y^N, r_z^N, v_x^1, v_y^1, v_z^1, \dots, v_x^N, v_y^N, v_z^N) \\ &\vdots \\ \frac{dv_z^N}{dt} &= f_{6N}(r_x^1, r_y^1, r_z^1, \dots, r_x^N, r_y^N, r_z^N, v_x^1, v_y^1, v_z^1, \dots, v_x^N, v_y^N, v_z^N) \end{aligned} \right\} 6N$$

# 変分原理

運動はラグランジアン の 時間積分 を 最小 に する よう に 決まる (※)

$$I = \int_{t_0}^{t_1} \mathcal{L}(\dot{r}, r) dt$$

$$\delta I = 0 \quad \rightarrow$$

$$\frac{dr_x^1}{dt} = f_1(r_x^1, r_y^1, r_z^1, \dots, r_x^N, r_y^N, r_z^N, v_x^1, v_y^1, v_z^1, \dots, v_x^N, v_y^N, v_z^N)$$

$$\vdots$$

$$\frac{dv_z^N}{dt} = f_{6N}(r_x^1, r_y^1, r_z^1, \dots, r_x^N, r_y^N, r_z^N, v_x^1, v_y^1, v_z^1, \dots, v_x^N, v_y^N, v_z^N)$$

※ 「最小」ではなく「極小」の方が正確だが、以下では「最小」を使う

# 変分原理



✕ A

歩きやすい

✕ B

歩きにくい

A地点からB地点まで最短時間で到達したい

# 変分原理



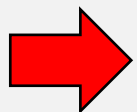
✕ A

歩きやすい

歩きにくい

✕ B

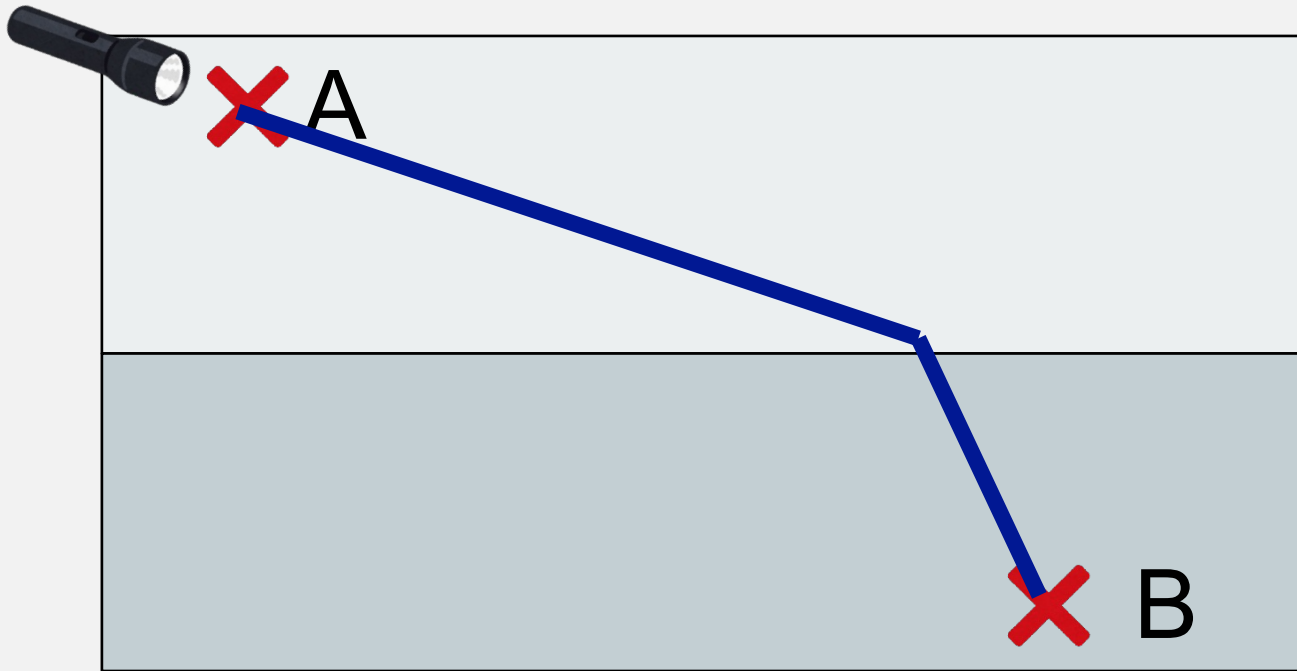
A地点からB地点まで最短時間で到達したい



歩きづらさの総和が最小になる経路を選ぶ

# 変分原理

光は空中から水中に入る際に屈折する



屈折率が小さい  
進みやすい  
光路長が短い

屈折率が大きい  
進みにくい  
光路長が長い

光の経路は、光学的距離を最小(極小)にするように決まる

# 変分原理

屈折率は、その場所における「光の進みづらさ」を表している  
光は「進みづらさ」を最小にしたい

点 $(x, y)$ における屈折率を $n(x, y)$ として、光の経路を $C$ とすると  
光路長を最小にするように経路が選ばれる(**フェルマーの原理**)

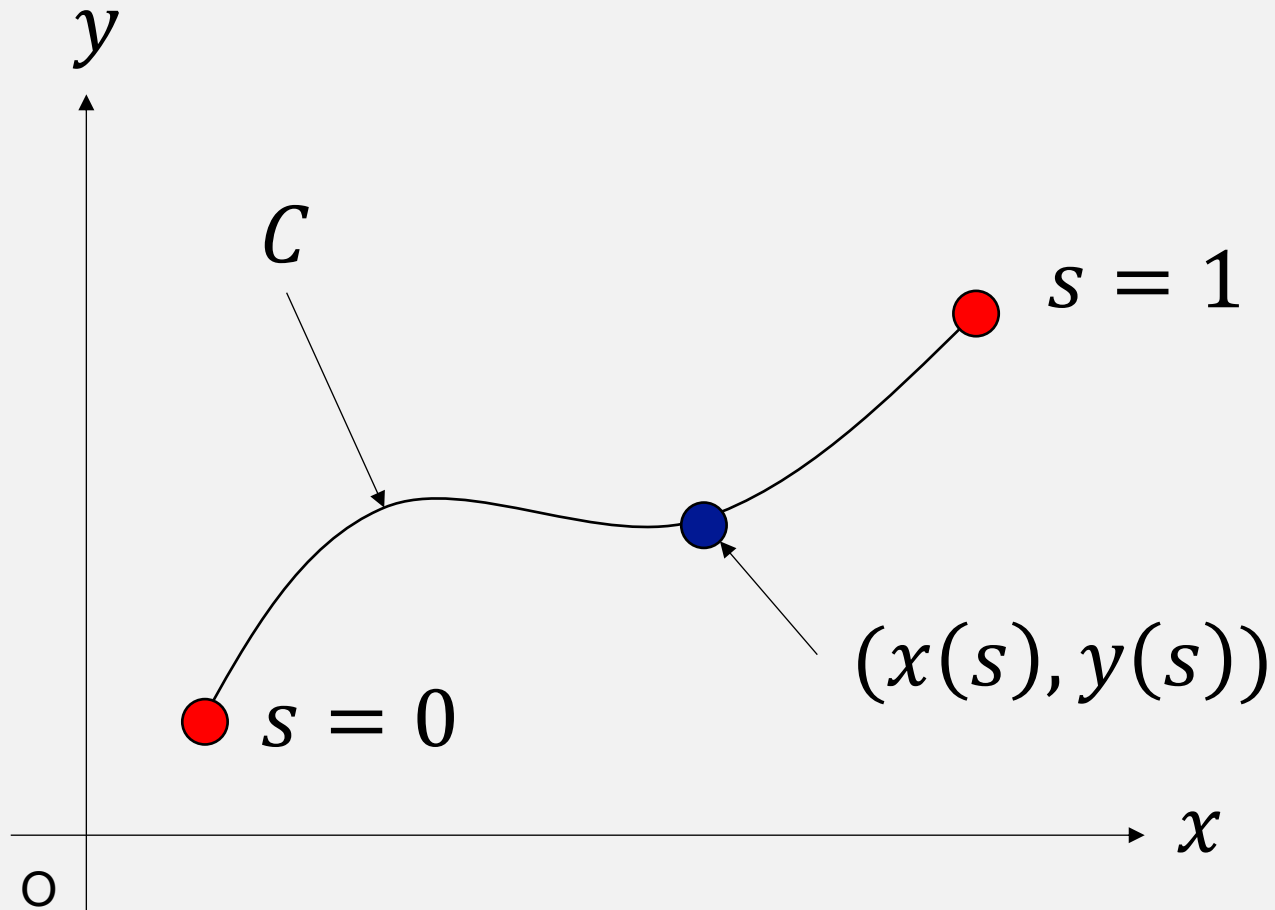
$$I = \int_C n(x, y) ds$$

この積分の意味は？

積分を最小にする経路とは？

# 変分原理

経路は一次元なので、一つのスカラーパラメータ  $s$  で指定できる



# 変分原理

屈折率 $n(x, y)$ は場所 $(x, y)$ の関数

→ 場所(ベクトル)が入力、スカラーが出力

経路 $C$ は、パラメータ $s$ の関数

→ スカラーが入力、場所(ベクトル)が出力

作用積分 $I$ は関数(経路)の汎関数

→ 経路が入力、スカラーが出力

ここを最小にするように

$$I = \int_C n(x, y) ds$$

ここを決めたい

➡ これを決める方法が汎関数微分



# 変分原理

$$I = \int_{t_0}^{t_1} \mathcal{L}(\dot{r}, r) dt$$

汎関数微分

$$\delta \mathcal{L} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{r}} \delta \dot{r} + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial r} \delta r$$

部分積分

$$= - \frac{d}{dt} \left( \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{r}} \right) \delta r + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial r} \delta r$$

$\delta r$ でまとめる

$$= \left( - \frac{d}{dt} \left( \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{r}} \right) + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial r} \right) \delta r$$

# 変分原理

$$I = \int_{t_0}^{t_1} \mathcal{L}(\dot{r}, r) dt \quad \text{が最小} \quad \rightarrow \delta I = 0$$

$$\delta I = 0 \rightarrow \delta \mathcal{L} = \underbrace{\left( -\frac{d}{dt} \left( \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{r}} \right) + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial r} \right)}_{=0} \delta r$$

以上から、

$$-\frac{d}{dt} \left( \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{r}} \right) + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial r} = 0$$

これをオイラー・ラグランジュ方程式とよぶ

# 多粒子系の変分原理

x,y,z方向を区別するのが面倒なので

$r_x^i = q_{3i}, r_y^i = q_{3i+1}, r_z^i = q_{3i+2}$  と通し番号をつける

$$\mathcal{L}(q_1, \dots, q_{3N}, \dot{q}_1, \dots, \dot{q}_{3N})$$

$$\delta I = 0 \quad \rightarrow \quad -\frac{d}{dt} \left( \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{r}_i} \right) + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial r_i} = 0$$

ひとつの多変数スカラー関数の変分から  
必要な数の微分方程式が全て得られる

# 変分原理のまとめ

- ラグランジアンは位相空間における「進みづらさ」を表す関数
- 作用積分とは軌道に沿ったラグランジアンの線積分であり、作用とは進みづらさの総和を意味する
- 多粒子系の運動方程式は連立微分方程式となるが、その全てが単一のスカラー関数であるラグランジアンの変分から得られる(オイラー・ラグランジュ方程式)

# ルジャンドル変換

ラグランジアンを第一引数をルジャンドル変換

$$p = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}} \quad \mathcal{H} = p\dot{q} - \mathcal{L}$$

$$\mathcal{L}(q, \dot{q}) \xrightarrow{\hspace{10em}} \mathcal{H}(q, p)$$

ラグランジアンから

ハミルトニアンへ

# ルジャンドル変換とは

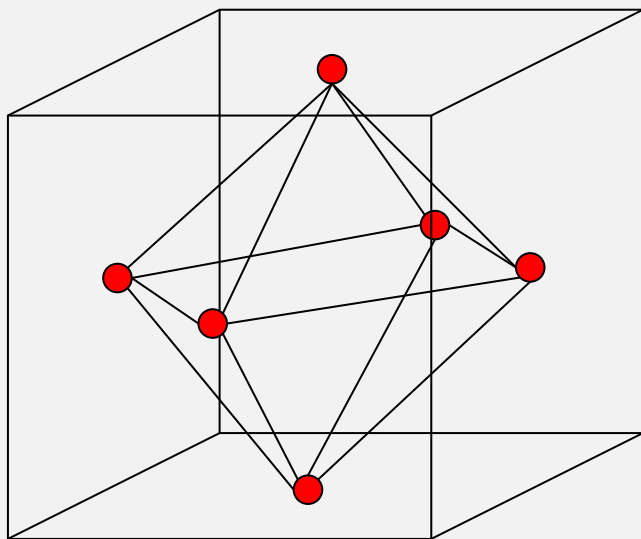
双対変換の一種

双対変換とは「何かを入れ替える」変換

二度行うとともに戻る

変換で情報は失われない

## 双対変換の例



正多面体の「点」と「面」の入れ替え

正四面体 $\longleftrightarrow$ 正四面体

正六面体 $\longleftrightarrow$ 正八面体

正四面体 $\longleftrightarrow$ 正八面体

正十二面体 $\longleftrightarrow$ 正二十面体

※フーリエ変換なども双対変換

# ルジャンドル変換

ルジャンドル変換は $(x, y)$ 空間から $(X, Y)$ への双対変換  
ルジャンドル変換には二つの表式がある

接線表式

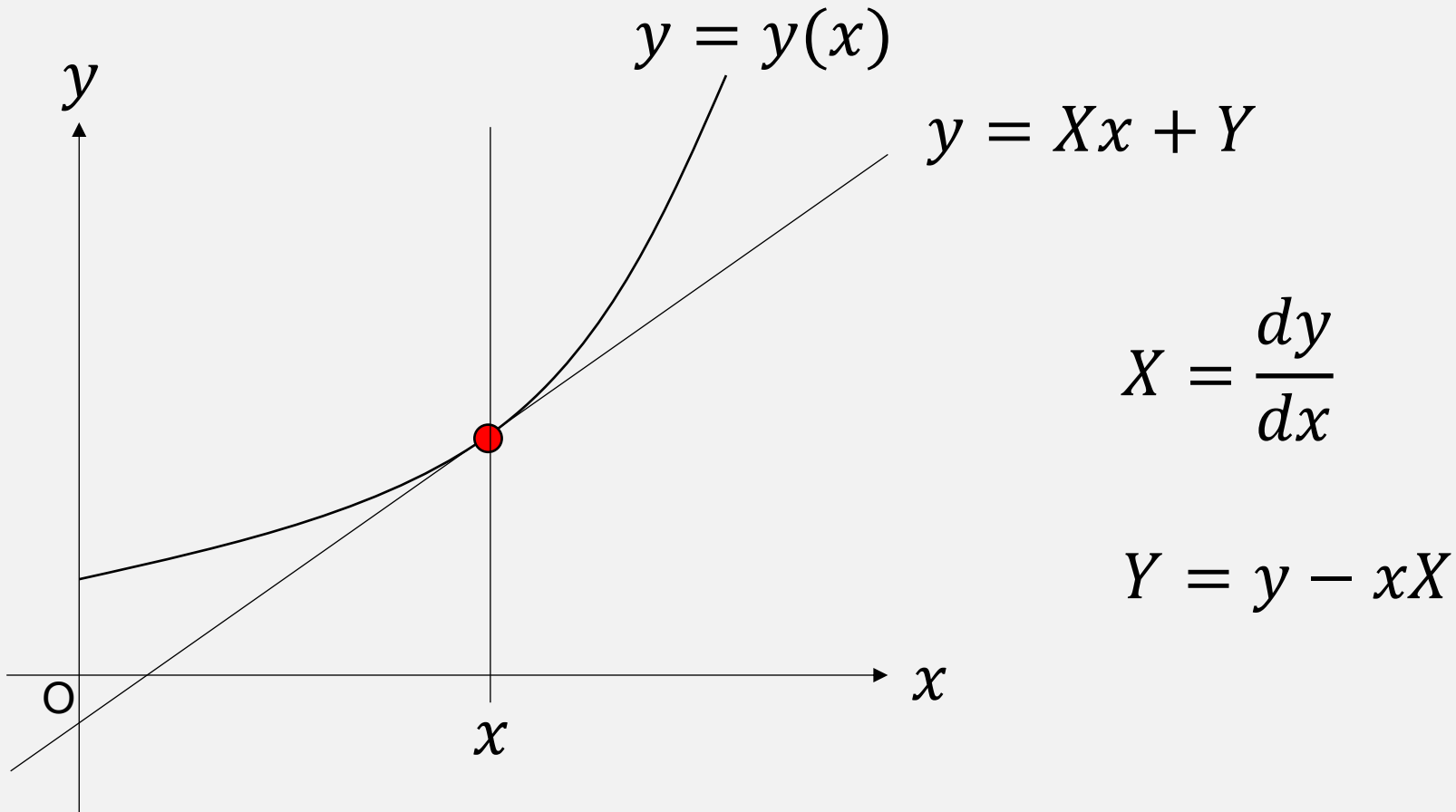
$$y = Xx + Y$$

面線表式

$$y + Y = xX$$

# 接線表式

関数  $y = y(x)$  の各点に接線をひく



接線の傾きを  $X$ 、 $y$ 切片を  $Y$  とする



# 接線表式

逆変換を考えてやると

$$X = \frac{dy}{dx}$$

$$x = - \frac{dY}{dX}$$

$$Y = y - xX$$

$$y = Y - xX$$

ここに余計な負符号がつく

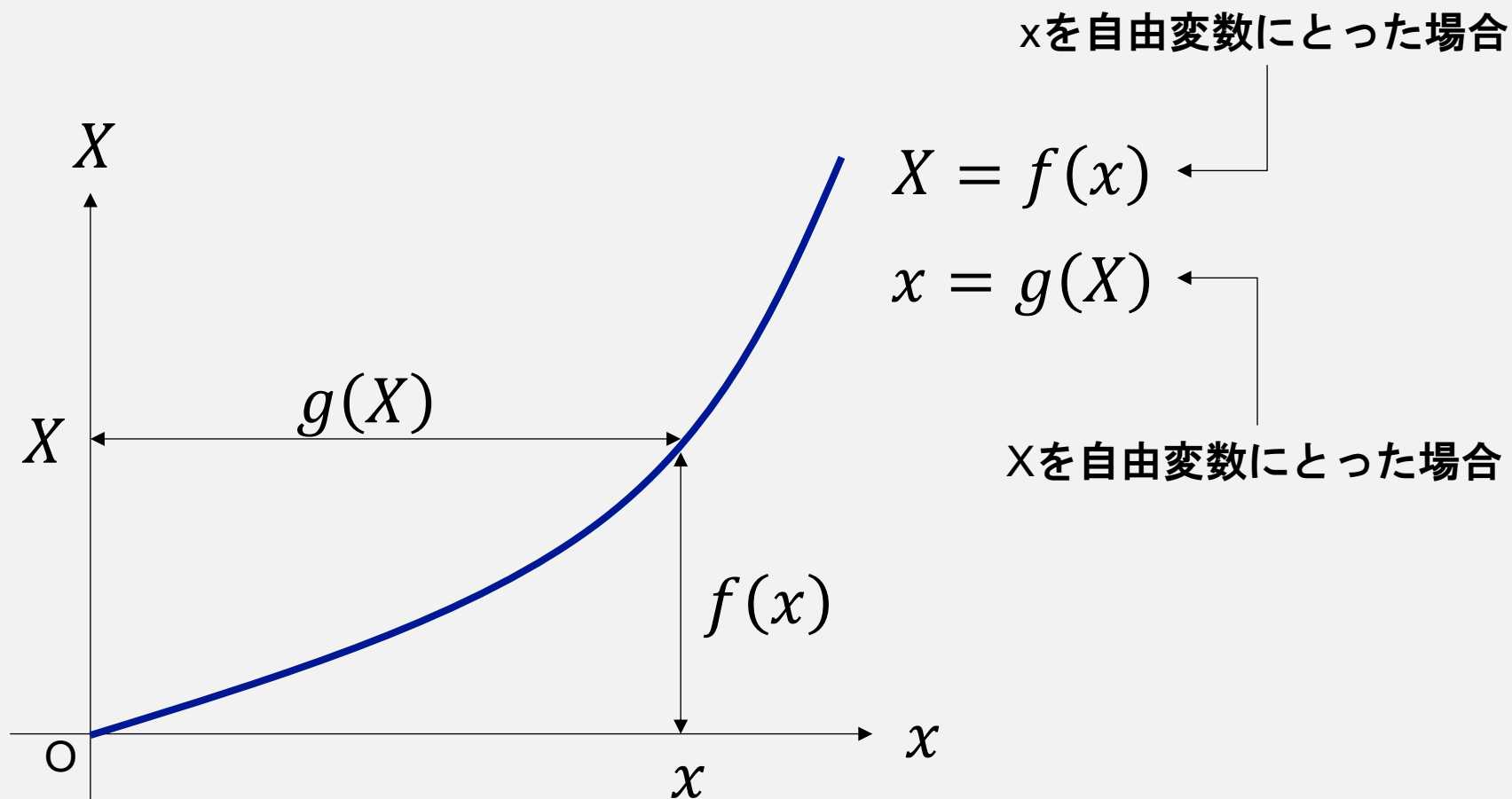
最終的に辻褄が合えばどうでも良いが、これを嫌って

$$Y = xX - y$$

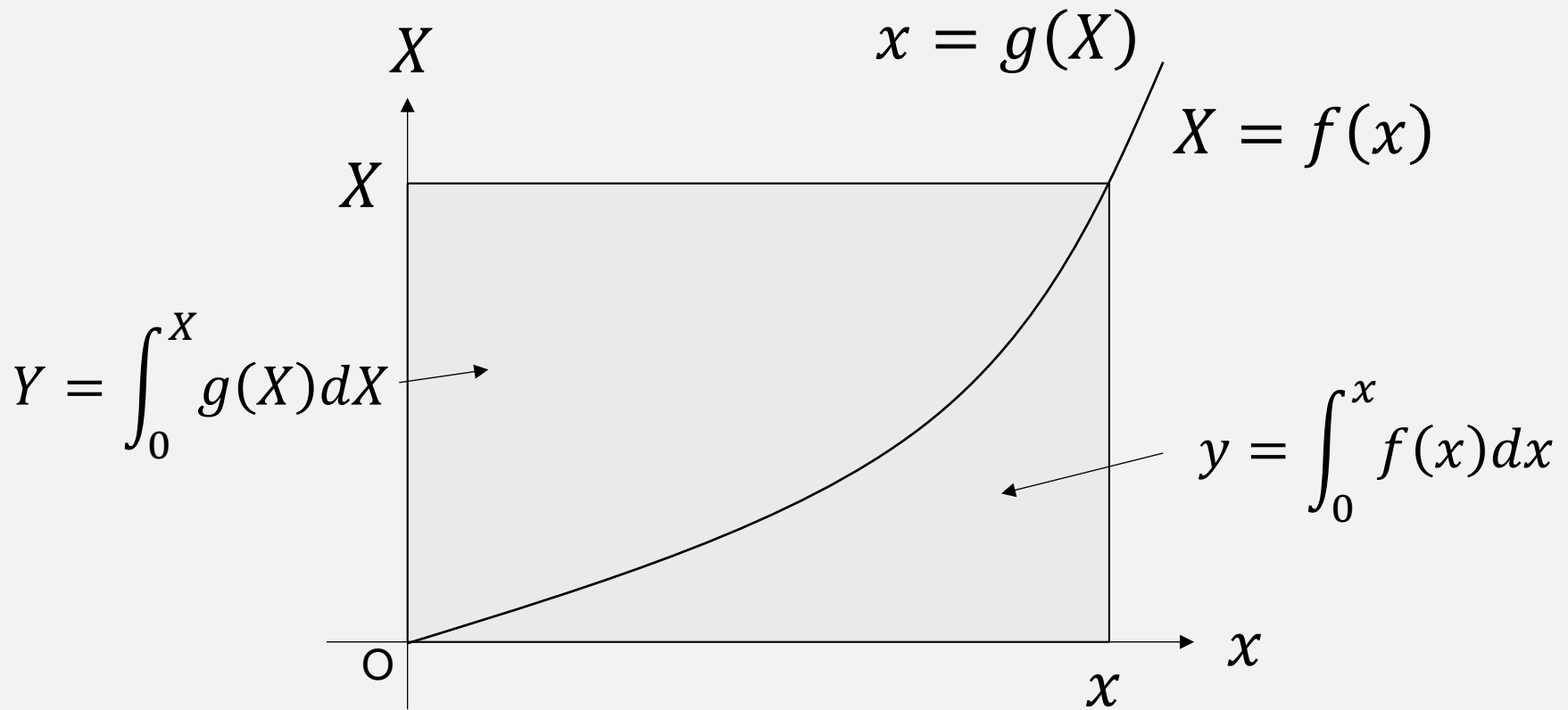
と定義すると、変換と逆変換が対称になる

# 面積表式

$(x, X)$ 空間上の曲線を考える



# 面積表式



$$\underline{y} + \underline{Y} = \underline{xX}$$

曲線の下側の面積

曲線の左側の面積

長方形の面積

# 面積表式

$$y + Y = xX$$

$$x = g(X) \quad Y = \int_0^X g(X) dX \quad \rightarrow \quad x = \frac{dY}{dX}$$

$$X = f(x) \quad y = \int_0^x f(x) dx \quad \rightarrow \quad X = \frac{dy}{dx}$$

変換公式が自然に対称になる

# ハミルトニアンの幾何学的解釈

オイラー・ラグランジュ方程式

ハミルトンの運動方程式

$$-\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}}\right) + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q} = 0$$



$$\frac{dp}{dt} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q}$$

$$\frac{dq}{dt} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p}$$

ルジャンドル変換は双対変換

双対変換は情報を保存する

→ハミルトニアンへの変換で情報は増えない

なぜハミルトニアンを考えるか？

➡ 見通しが良くなるから

# ハミルトニアンの幾何学的解釈

## ハミルトンの運動方程式

$$\frac{dp}{dt} = - \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q} \quad \frac{dq}{dt} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p}$$

$\mathcal{H}$ の時間微分

$$\begin{aligned} \frac{d\mathcal{H}}{dt} &= \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p} \dot{p} + \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q} \dot{q} \\ &= - \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q} + \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p} = 0 \end{aligned}$$

エネルギーの時間微分がゼロ→エネルギーが保存する

➡ この事実の幾何学的な意味を考える

# ハミルトニアンの幾何学的解釈

pとqをまとめて一つのベクトルで表現する

$$\vec{z} = \begin{pmatrix} p \\ q \end{pmatrix}$$

ハミルトニアンの勾配(gradient)を求める

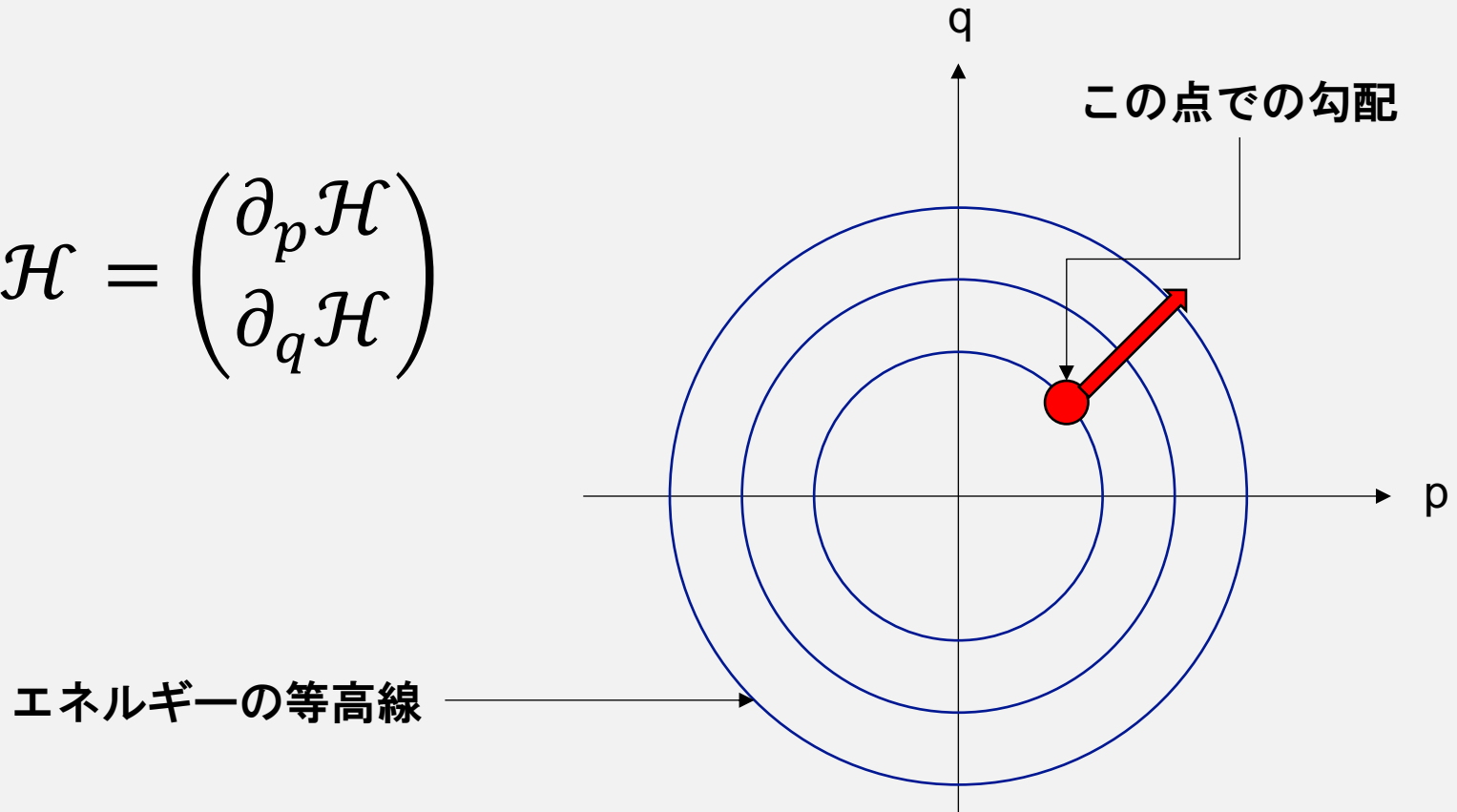
$$\nabla \mathcal{H} = \begin{pmatrix} \partial_p \mathcal{H} \\ \partial_q \mathcal{H} \end{pmatrix}$$

運動方程式がベクトルの式で表現できる

$$\frac{d\vec{z}}{dt} = \begin{pmatrix} \dot{p} \\ \dot{q} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \nabla \mathcal{H}$$

# ハミルトニアンの幾何学的解釈

$$\nabla \mathcal{H} = \begin{pmatrix} \partial_p \mathcal{H} \\ \partial_q \mathcal{H} \end{pmatrix}$$



スカラー場の勾配は、最も変化が大きい方向へのベクトル  
勾配ベクトルは等高線と直交する

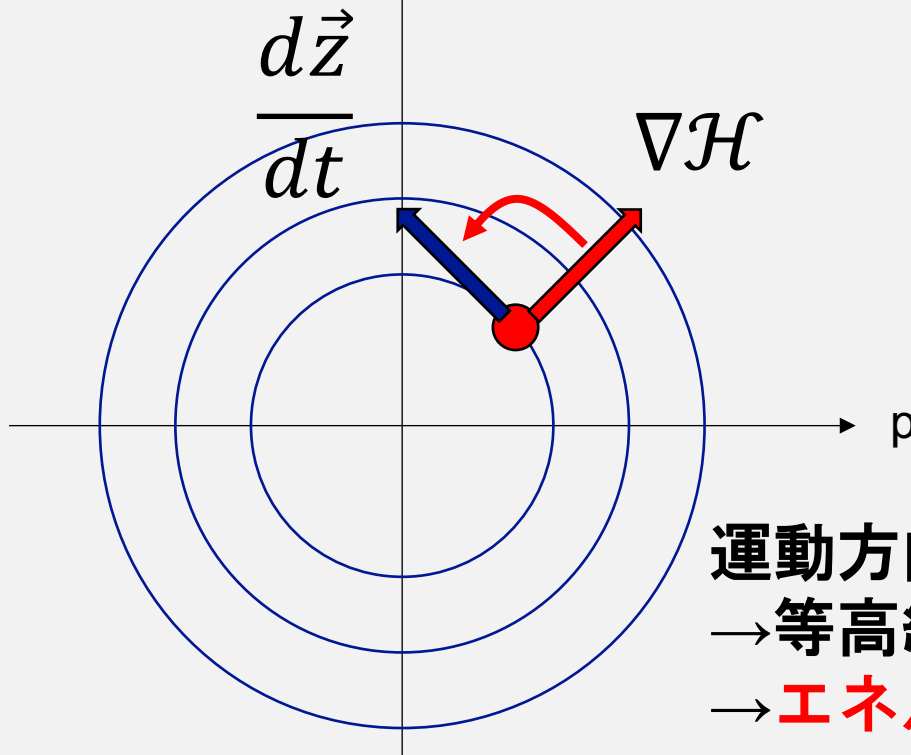


# ハミルトニアン幾何学的解釈

勾配ベクトルを

$$\frac{d\vec{z}}{dt} = \begin{pmatrix} \dot{p} \\ \dot{q} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\partial_q \mathcal{H} \\ \partial_p \mathcal{H} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \nabla \mathcal{H}$$

90度回している



運動方向は、勾配ベクトルと直交する  
→ 等高線に沿って運動する  
→ エネルギーが保存する

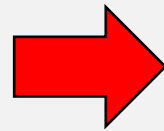
# ハミルトニアンの幾何学的解釈

ハミルトンの運動方程式

速度場の発散(divergence)がゼロ

$$\frac{dp}{dt} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q}$$

$$\frac{dq}{dt} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p}$$



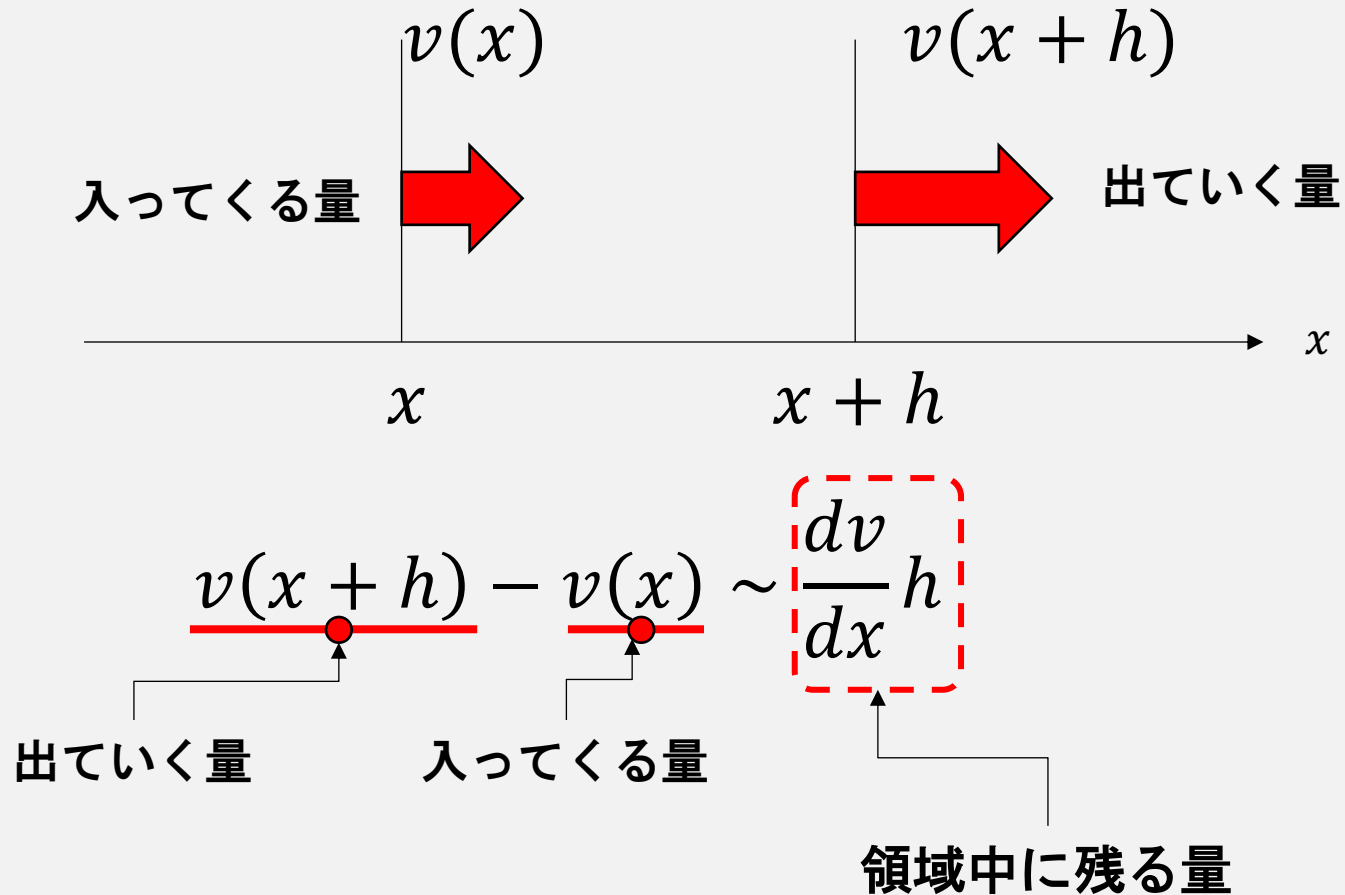
$$\nabla \frac{d\vec{z}}{dt} = \frac{\partial \dot{p}}{\partial p} + \frac{\partial \dot{q}}{\partial q} = 0$$

$\frac{d\vec{z}}{dt}$  ハミルトニアンが作るベクトル場  
→ ハミルトンベクトル場

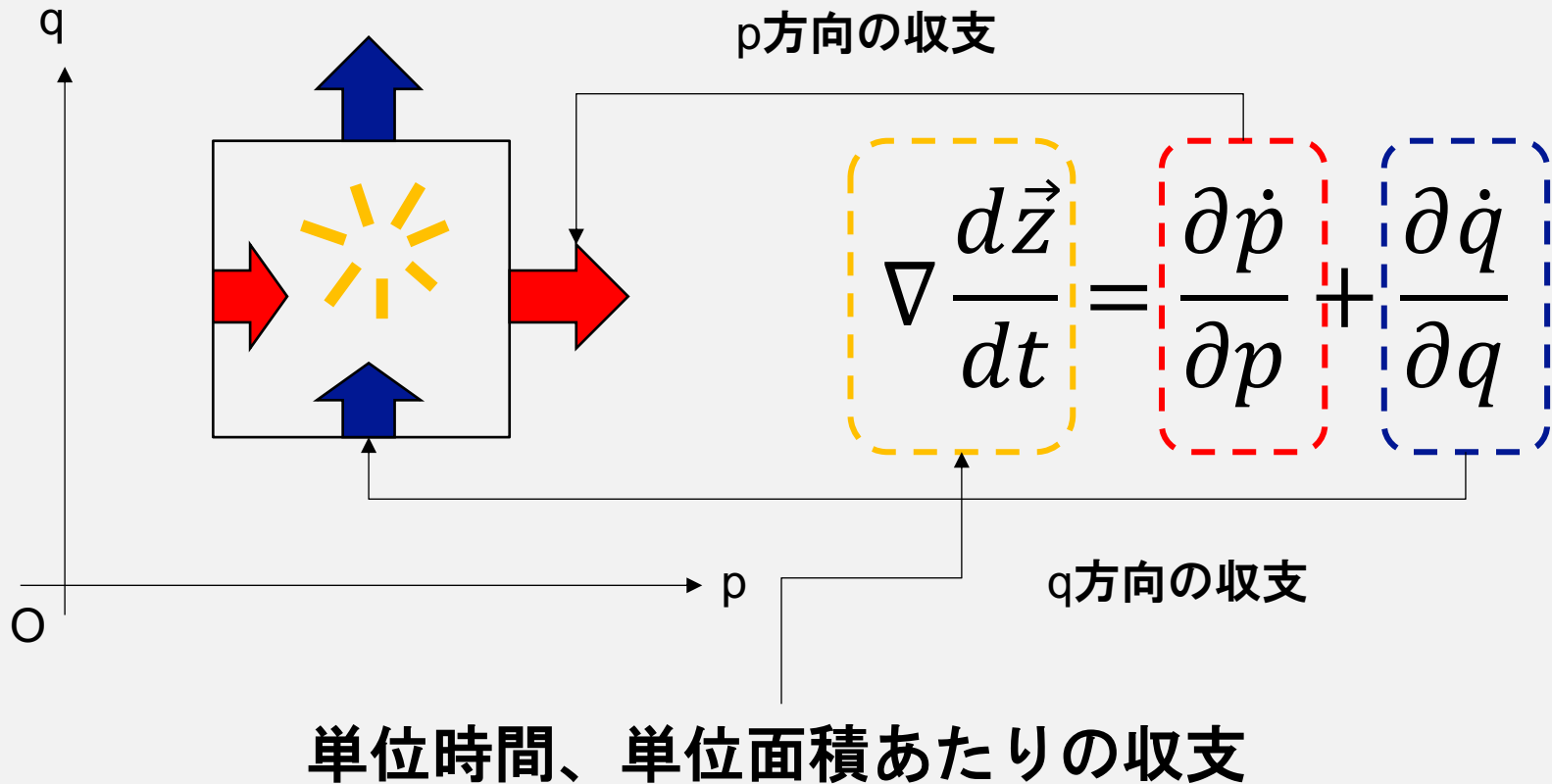
ハミルトンベクトル場の発散がゼロの意味とは？

# 発散(divergence)

## 速度場 $v(x)$ の発散



# 発散(divergence)



速度場の発散は、その点における量の非保存を意味する

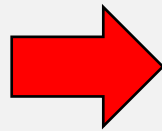
# ハミルトニアンの幾何学的解釈

ハミルトンの運動方程式

速度場の発散(divergence)がゼロ

$$\frac{dp}{dt} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q}$$

$$\frac{dq}{dt} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p}$$



$$\nabla \frac{d\vec{z}}{dt} = \frac{\partial \dot{p}}{\partial p} + \frac{\partial \dot{q}}{\partial q} = 0$$

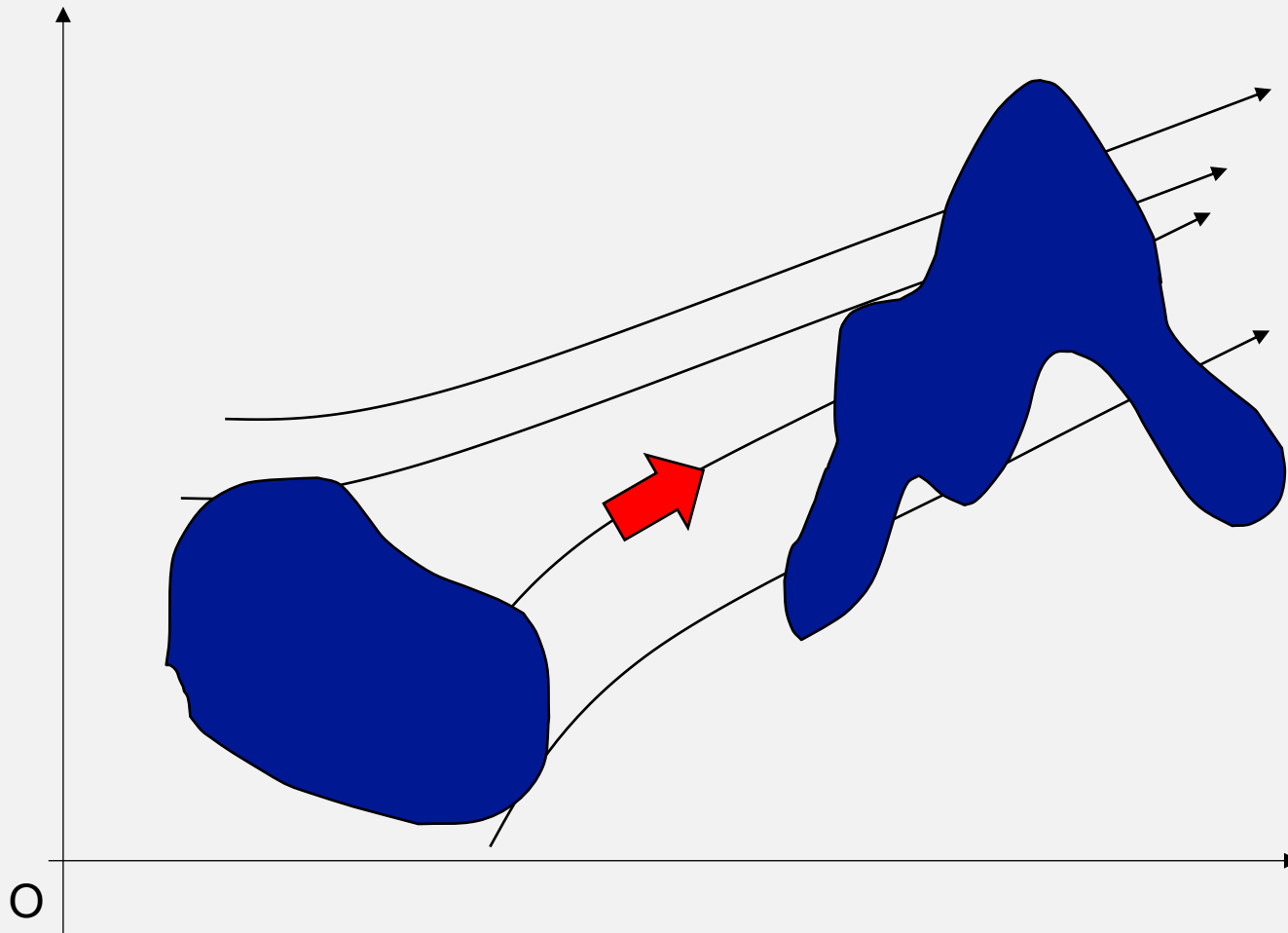
速度場の発散がゼロ

→各点で入ってくる量と出ていく量が等しい

→流れに沿って密度が変化しない

→ハミルトンベクトル場は非圧縮流

# ハミルトニアン の幾何学的解釈



非圧縮流：流れに沿って位相空間体積が変化しない

# ハミルトニアンの幾何学的解釈のまとめ

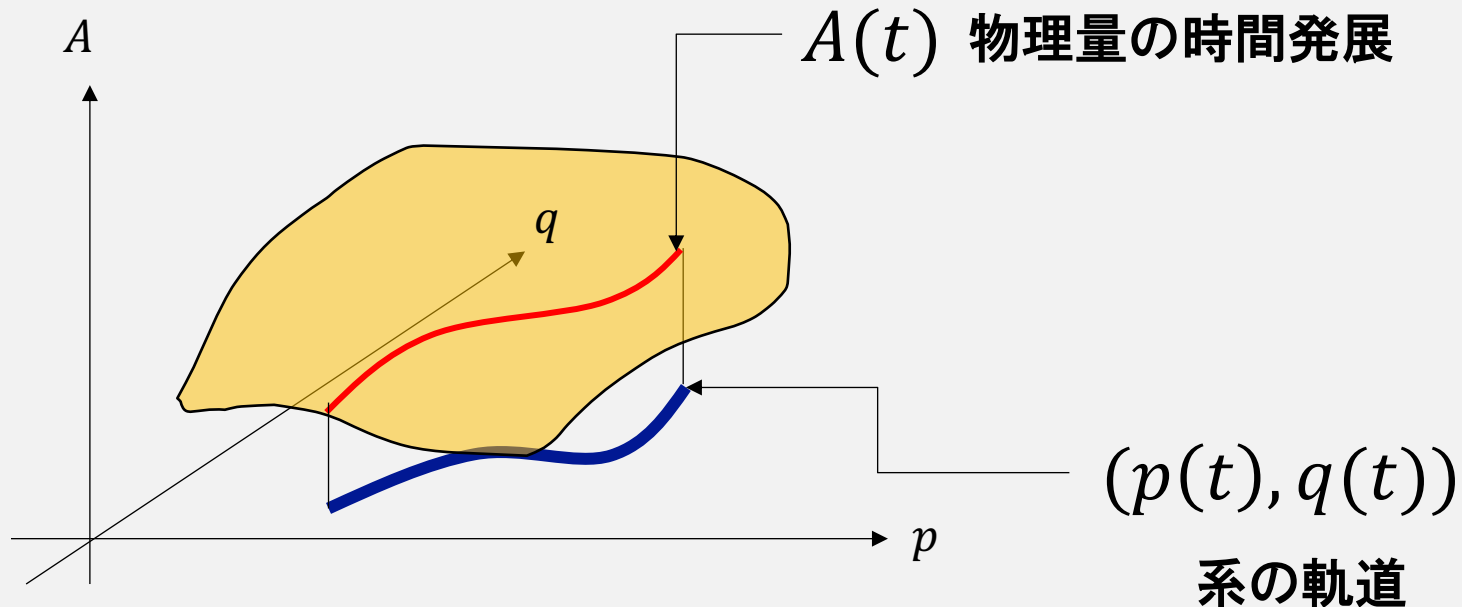
- ハミルトンの運動方程式は、位相空間に流れ場を作る(ハミルトンベクトル場)
- ハミルトンベクトル場は、回転する流れを表現している
- ハミルトンベクトル場は、非圧縮流になっている

時間発展とは、位相空間における回転

# 時間発展とリュービル演算子

一次元一自由度系  $(p, q)$  における物理量  $A$  を考える  
点  $(p(t), q(t))$  は運動方程式に従って時間発展する  
この世界の物理量は全て  $(p, q)$  の関数として表現できる  
→  $A$  は  $(p, q)$  の関数

$$A(p(t), q(t)) \rightarrow A(t) \text{ と略記}$$





# 時間発展とリュービル演算子

時刻  $t + h$  における値  $A(t + h)$  のテイラー展開を考える

$$A(t + h) = A(t) + h \frac{dA}{dt} + \frac{h^2}{2} \frac{d^2 A}{dt^2} + \dots$$

$$= \sum_{k=0} \frac{h^k}{k!} \frac{d^k}{dt^k} A(t)$$

$$= \exp \left( h \frac{d}{dt} \right) A(t)$$

$$\equiv U(h) A(t)$$

$U(h)$

# 時間発展とリュービル演算子

$$\underline{U(h)A(t)} = A(\underline{t+h})$$

$A(t)$ に $U(h)$ をかけると

時刻が $h$ だけ進む

$$U(h) = \exp\left(h \frac{d}{dt}\right) \quad \text{は時間発展演算子}$$

# 時間発展とリュービル演算子

$A$ の時間微分を考える

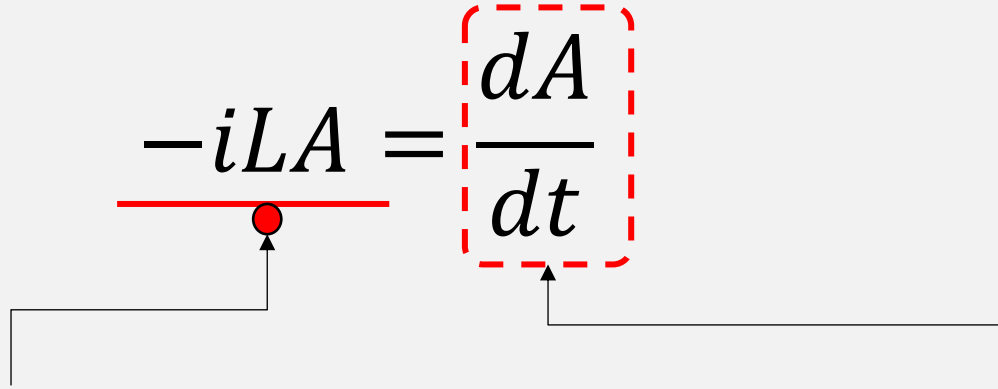
$A$ は $(p, q)$ の関数であったから

$$\frac{dA}{dt} = \frac{\partial A}{\partial p} \dot{p} + \frac{\partial A}{\partial q} \dot{q}$$

$$= \left( \dot{p} \frac{\partial}{\partial p} + \dot{q} \frac{\partial}{\partial q} \right) A$$

$$= -iLA$$


# 時間発展とリュービル演算子

$$\frac{-iLA}{\text{red dot}} = \frac{dA}{dt}$$


$A(t)$ に $-iL$ をかけると

時間微分が得られる

$$-iL = \left( \dot{p} \frac{\partial}{\partial p} + \dot{q} \frac{\partial}{\partial q} \right) \text{ は時間微分演算子}$$

これをリュービル演算子(Liouville operator)と呼ぶ

※ 虚数単位をつけるのは、演算子をエルミートにするため

※ 物理量にかける場合は負符号をつける

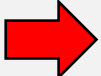
# 時間発展とリュービル演算子

形式的に積分する

$$-iLA = \frac{dA}{dt} \quad \text{微分して自分自身が出てくるので指数関数}$$

$$A(t+h) = \boxed{\exp(-ihL)} A(t)$$

$$A(t+h) = \boxed{U(h)} A(t) \quad \text{時間発展演算子の定義}$$

  $U(h) = \exp(-ihL)$

時間発展演算子はリュービル演算子を指数関数の肩に載せたもの

# 時間発展とリュービル演算子

任意の物理量 $A$ について  $\frac{dA}{dt} = -iLA$  なので

$$\boxed{\frac{d}{dt}} = -iL$$

$$U(h) = \exp\left(h \boxed{\frac{d}{dt}}\right)$$

微分演算子をリュービル演算子  
で置き換えた

# 時間発展とリュービル演算子

## 一次元調和振動子の運動方程式

$$\dot{p} = -q$$

$$\dot{q} = p$$

$$\vec{z}(t) = \begin{pmatrix} p(t) \\ q(t) \end{pmatrix} \quad \text{とベクトル表示すると}$$

$$\frac{d}{dt} \vec{z} = L \vec{z}$$

リュービル演算子の行列表示

$$L = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

※計算の煩雑さをさけるため、負符号と虚数単位は省いてある

# 時間発展とリュービル演算子

$$\frac{d}{dt}\vec{Z} = L\vec{Z} \quad \text{を形式的に解くと}$$

$$\vec{Z}(t+h) = \boxed{\exp(hL)}\vec{Z}(t)$$

↑  
 $U(h)$

$$\exp(hL) = I + hL + \frac{h^2}{2}L^2 + \cdots + \frac{h^k}{k!}L^k + \cdots$$

$$L = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad L^2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad \text{などから厳密に計算できる}$$



# 時間発展とリュービル演算子

$$L = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \text{回転行列の生成子 (微小回転)}$$

$$\exp(hL) = \begin{pmatrix} \cos h & -\sin h \\ \sin h & \cos h \end{pmatrix} \quad \text{回転行列}$$

リュービル演算子は回転の「方向」を表現している  
時間発展演算子は有限の回転を表現している

# 時間発展とリュービル演算子のまとめ

時間を進める演算子が時間発展演算子

$$U(h)A(t) = A(t + h)$$

時間で微分する演算子がリュービル演算子

$$-iLA(t) = \frac{dA}{dt}$$

リュービル演算子を指数関数の肩に載せたものが  
時間発展演算子

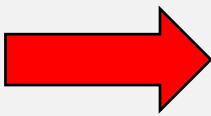
$$U(h) = \exp(-ihL)$$

時間発展とは回転であり、有限の回転を表現するのが  
時間発展演算子で、無限小の回転を表現するのが  
リュービル演算子

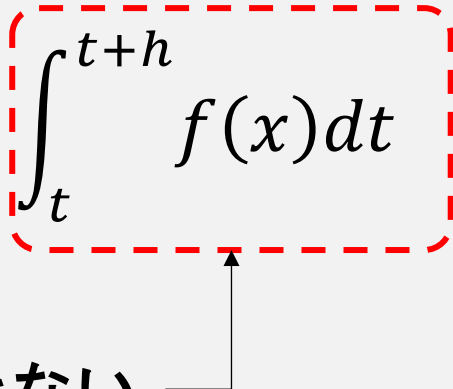
# 時間積分

微分方程式が与えられている時、現時点での値から将来を予測したい

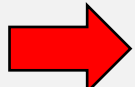
方程式  $\frac{dx}{dt} = f(x)$       未来の値  
初期値  $x(t)$        $x(t+h)$



厳密な表式

$$x(t+h) = x(t) + \int_t^{t+h} f(x) dt$$


この積分が厳密評価できない

  $x(t+h)$  を  $x(t)$  と  $f(x)$  で近似する

# 時間積分

積分区間が短いと思って $f(x)$ を定数で近似する

$$x(t+h) = x(t) + \int_t^{t+h} f(x) dt$$
$$\sim x(t) + f(x)h$$

知りたい量

知ってる量

$$x(t+h) = x(t) + f(x(t))h$$

未知の量 $x(t+h)$ を、既知の量 $x(t)$ と $f(x(t))$ だけで表現できた

この数値積分法をオイラー法と呼ぶ

# 運動方程式の積分

運動方程式

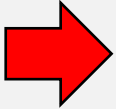
$$\frac{dp}{dt} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q}$$
$$\frac{dq}{dt} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p}$$

未来の値

$p(t+h), q(t+h)$

現在の値

$p(t), q(t)$



運動方程式を使って、未来の値を現在の値の関数として表現したい

# オイラー法

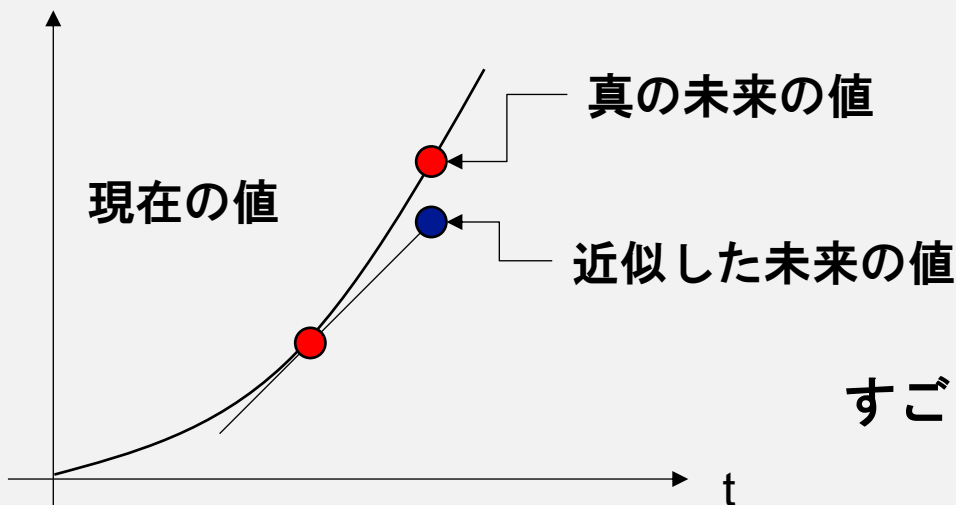
運動方程式にオイラー法を適用する

$$p(t+h) = p(t) + \dot{p}(t)h = p(t) - \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q} h$$

$$q(t+h) = q(t) + \dot{q}(t)h = q(t) + \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p} h$$

現在の値

現在の微分係数  
(傾き)



すごくずれていきそうな気がする

# オイラー法

調和振動子の運動方程式をオイラー法で解くコード

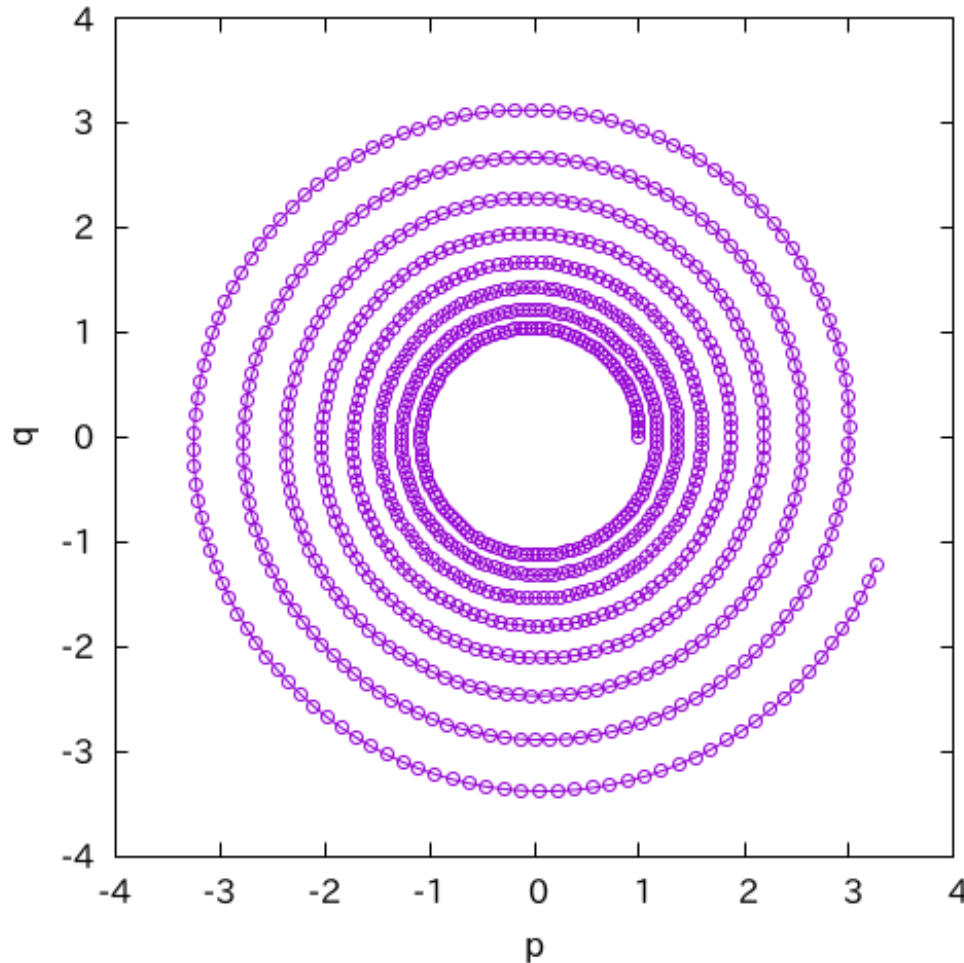
```
t = 0
h = 0.05
p = 1.0
q = 0.0
T = 1000

for _ in range(T):
    print(f"{t} {p} {q}")
    t = t + h
    dp = - q * h
    dq = p * h
    p += dp
    q += dq
```

$$p(t + h) = p(t) - q(t)h$$
$$q(t + h) = q(t) + p(t)h$$

# オイラー法

## オイラー法で計算した調和振動子の軌道



単位円を描くべき軌道が  
徐々に広がっている  
→エネルギーが増えている



# オイラー法

調和振動子にオイラー法を適用

$$p(t+h) = p(t) - q(t)h$$

$$q(t+h) = q(t) + p(t)h$$

行列表示

$$\begin{pmatrix} p(t+h) \\ q(t+h) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & -h \\ h & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p(t) \\ q(t) \end{pmatrix}$$

行列式 =  $1 + h^2 > 1$

厳密解

$$\begin{pmatrix} p(t+h) \\ q(t+h) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos h & -\sin h \\ \sin h & \cos h \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p(t) \\ q(t) \end{pmatrix}$$

行列式 = 1

位相空間の面積非保存がエネルギー非保存の原因

# Velocity Verlet法

オイラー法は、テイラー展開の一次まで正しいコード  
→高次の積分法を構築する

以下の運動方程式を考える

$$\dot{p} = \underline{f(q)}, \dot{q} = p$$

→ ポテンシャル力

位置を二次までテイラー展開

$$\begin{aligned} q(t+h) &= q(t) + \dot{q}(t)h + \frac{\ddot{q}(t)h^2}{2} \\ &= q(t) + p(t)h + \frac{f(t)h^2}{2} \end{aligned}$$

# Velocity Verlet法

運動量も二次までテイラー展開

$$\begin{aligned} p(t+h) &= p(t) + \dot{p}(t)h + \frac{\ddot{p}(t)h^2}{2} \\ &= p(t) + f(t)h + \frac{\dot{f}(t)h^2}{2} \end{aligned}$$

$\left[ \frac{df}{dt} \right] \sim \frac{f(t+h) - f(t)}{h}$  力の時間微分を差分近似して代入

$$p(t+h) = p(t) + \frac{f(t+h) + f(t)}{2} h$$

先に $q(t+h)$ が求まっているので値がわかる

# Velocity Verlet法

以下の運動方程式について

$$\dot{p} = -f(q), \dot{q} = p$$

以下の二次の数値積分法を得た

$$\begin{cases} q(t+h) = q(t) + p(t)h + \frac{f(t)h^2}{2} \\ p(t+h) = p(t) + \frac{f(t+h) + f(t)}{2}h \end{cases}$$

これをVelocity Verlet法と呼ぶ

※ 速度ベルレ法や、ベレの方法などとも呼ばれる

# Velocity Verlet法

調和振動子の運動方程式をVelocity Verlet法で解くコード

```
t = 0
h = 0.05
p = 1.0
q = 0.0
T = 1000

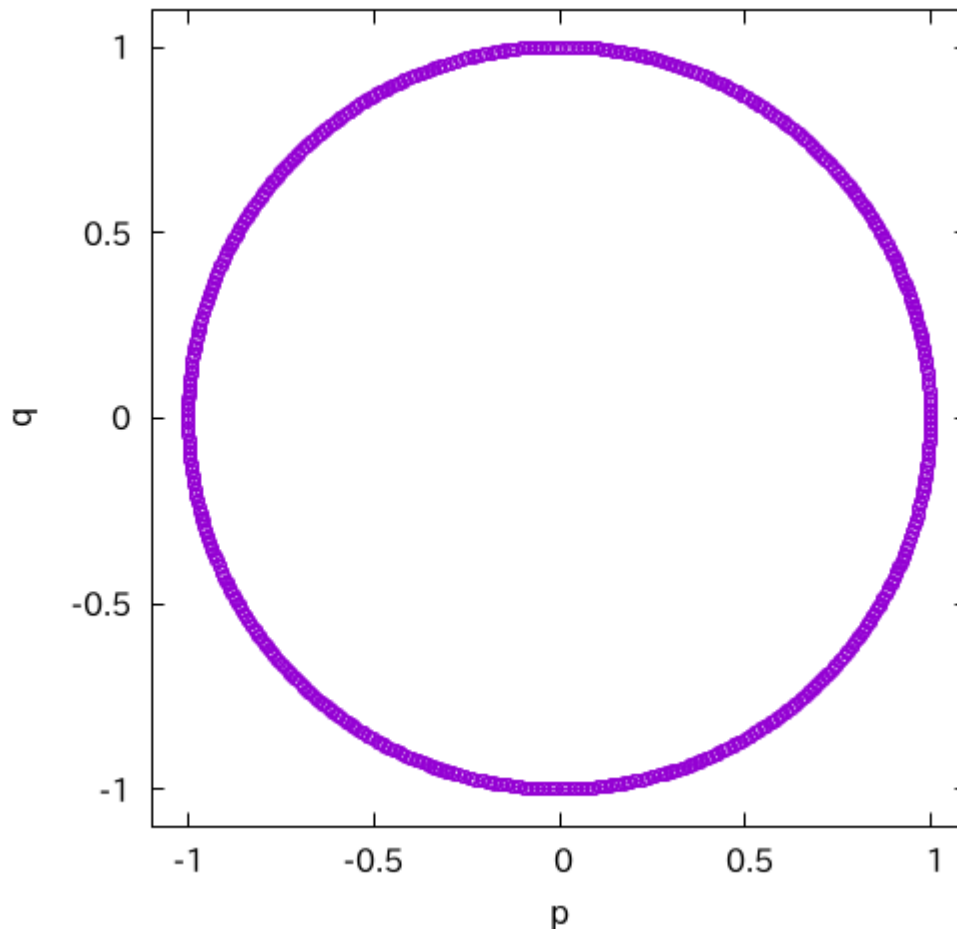
for _ in range(T):
    print(f"{t} {p} {q}")
    t = t + h
    ft = -q
    q += p * h - q * h**2 * 0.5
    ft2 = -q
    p += (ft2 + ft) * h * 0.5
```

$$q(t+h) = q(t) + p(t)h + \frac{f(t)h^2}{2}$$

$$p(t+h) = p(t) + \frac{f(t+h) + f(t)}{2}h$$

# Velocity Verlet法

Velocity Verlet法で計算した調和振動子の軌道



軌道が完全な円を描いている

# Velocity Verlet法

調和振動子にVelocity Verlet法を適用

$$q(t+h) = q(t) + p(t)h + \frac{f(t)h^2}{2} \quad p(t+h) = p(t) + \frac{f(t+h) + f(t)}{2}h$$

行列表示

$$\begin{pmatrix} p(t+h) \\ q(t+h) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 - h^2/2 & -h \\ -h + h^3/4 & 1 - h^2/2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p(t) \\ q(t) \end{pmatrix}$$

行列式 = 1

厳密解

$$\begin{pmatrix} p(t+h) \\ q(t+h) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos h & -\sin h \\ \sin h & \cos h \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p(t) \\ q(t) \end{pmatrix}$$

行列式 = 1

Velocity Verlet法は時間発展演算子を近似しているが、  
行列式は厳密に1

# Velocity Verlet法

$p(t + h) = P, q(t + h) = Q$  と書く

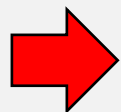
数値積分法とは $(p, q)$ から $(P, Q)$ への写像を作るもの

厳密な時間発展ではエネルギーが保存する

$$\frac{p^2}{2} + \frac{q^2}{2} = \frac{P^2}{2} + \frac{Q^2}{2}$$

Velocity Verletでは「ずれた」エネルギーが厳密に保存する

$$\frac{p^2}{2} + \left(1 - \frac{h^2}{4}\right) \frac{q^2}{2} = \frac{P^2}{2} + \left(1 - \frac{h^2}{4}\right) \frac{Q^2}{2}$$



エネルギーが真の値のまわりを揺らぎながらも保存する



# シンプレクティック積分

リウービル演算子

$$\frac{d}{dt} = -iL = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q} \frac{\partial}{\partial p} + \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p} \frac{\partial}{\partial q}$$

時間発展演算子

$$U(h) = \boxed{\exp(-ihL)}$$

一般に厳密に計算できない

リウービル演算子から近似した時間発展演算子を作りたい

# シンプレクティック積分

ハミルトニアンが運動項とポテンシャル項に分離しているとする

$$\mathcal{H}(p, q) = K(p) + V(q)$$

リュービル演算子も二つに分解する

$$\begin{aligned} -iL &= -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q} \frac{\partial}{\partial p} + \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p} \frac{\partial}{\partial q} \\ &= \underbrace{-\frac{\partial V}{\partial q} \frac{\partial}{\partial p}}_{-iL_V} + \underbrace{\frac{\partial K}{\partial p} \frac{\partial}{\partial q}}_{-iL_K} \\ &= -iL_V + -iL_K \end{aligned}$$

# シンプレクティック積分

ハミルトニアンが運動項とポテンシャル項に分かれている時

$$\mathcal{H}(p, q) = K(p) + V(q)$$

$-iL_V$  を  $q$  に演算すると消える

$$(-iL_V)q = \left(-\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q} \frac{\partial}{\partial p}\right)q = 0$$

$-iL_V$  を  $p$  に二回演算すると消える

$$(-iL_V)p = \left(-\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q} \frac{\partial}{\partial p}\right)p = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q}$$

$$(-iL_V)^2 p = \left(-\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q} \frac{\partial}{\partial p}\right) \left(-\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q}\right) = 0$$

※  $-iL_K$  も同様

$p$  による偏微分

$q$  だけの関数

# シンプレクティック積分

$$U_K(h) = \exp(-ihL_K)$$

$$= 1 + (-ihL_K) + \frac{(-ihL_K)^2}{2} + \dots$$

$$= 1 + (-ihL_K)$$

ここがゼロなので

これ以降全部ゼロ

同様に  $U_V(h) = \exp(-ihL_V) = 1 + (-ihL_V)$

$U(h) = \exp(-ihL)$  は厳密に求められないが

$\exp(-iL_K)$  や  $\exp(-iL_V)$  は厳密に求めることができる

# シンプレクティック積分

一般に演算子 $A$ と $B$ について

$$\exp(A + B) \neq \exp A \exp B$$

しかし、以下が成り立つ(Lie-Trotter公式)

$$\exp(A + B) = \lim_{n \rightarrow \infty} (\exp(A/n) \exp(B/n))^n$$

有限の $n$ で止めることで、以下の近似式を得る

一次の公式

$$\exp(h(A + B)) = \exp(hA) \exp(hB) + O(h^2)$$

二次の公式

$$\exp(h(A + B)) = \exp(hA/2) \exp(hB) \exp(hA/2) + O(h^3)$$

# シンプレクティック積分

リュービル演算子を二つに分解する

$$-iL = -iL_V + -iL_K$$

求めたい時間発展演算子をLie-Trotter公式で分解する

$$U(h) = \exp(-ihL)$$

$$= \exp(-ih(L_V + L_K))$$

$$= \exp(-ihL_V) \exp(-ihL_K) + O(h^2)$$

$\tilde{U}_1(h)$  一次近似された時間発展演算子

$$= \exp(-ihL_V/2) \exp(-ihL_K) \exp(-ihL_V/2) + O(h^3)$$

$\tilde{U}_2(h)$  二次近似された時間発展演算子

# シンプレクティック積分

## 厳密な時間発展

$$\begin{pmatrix} P \\ Q \end{pmatrix} = U(h) \begin{pmatrix} p \\ q \end{pmatrix} = \exp(-ihL) \begin{pmatrix} p \\ q \end{pmatrix}$$

## 一次近似された時間発展

最初にこれを演算して

$$\begin{pmatrix} P \\ Q \end{pmatrix} = \tilde{U}_1(h) \begin{pmatrix} p \\ q \end{pmatrix} = \boxed{\exp(-ihL_K) \exp(-ihL_V)} \begin{pmatrix} p \\ q \end{pmatrix}$$

次にこれを演算する

このように、指数分解公式で作られた時間発展演算子を使う  
数値積分法を**シンプレクティック積分法**と呼ぶ

# シンプレクティック積分

$U_V(h)$ を $p$ に演算してみる

$U_K(h)$ を $q$ に演算してみる

$$U_V(h)p = \exp(-ihL_V)p$$

$$U_K(h)q = \exp(-ihL_K)q$$

$$= (1 - ihL_V)p$$

$$= (1 - ihL_K)q$$

$$= \left(1 - h \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q} \frac{\partial}{\partial p}\right)p$$

$$= \left(1 + h \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p} \frac{\partial}{\partial q}\right)q$$

$$= p - h \frac{\partial V}{\partial q}$$

$$= q + h \frac{\partial K}{\partial q}$$

$p$ の時間を $h$ だけ進める

$q$ の時間を $h$ だけ進める

それぞれ、お互いを無視して時間 $h$ だけ運動



# シンプレクティック積分

## 調和振動子の場合

$p$ の時間を $h$ だけ進める演算子

$$U_V(h) \begin{pmatrix} p \\ q \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p - hq \\ q \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & -h \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p \\ q \end{pmatrix}$$

$q$ の時間を $h$ だけ進める演算子

$$U_K(h) \begin{pmatrix} p \\ q \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p \\ q + hp \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ h & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p \\ q \end{pmatrix}$$

二つともかけると

$$U_K(h)U_V(h) \begin{pmatrix} p \\ q \end{pmatrix} = \boxed{\begin{pmatrix} 1 & -h \\ h & 1 - h^2 \end{pmatrix}} \begin{pmatrix} p \\ q \end{pmatrix}$$

行列式が1

# シンプレクティック積分

$(p, q)$  から  $(P, Q)$  への変換

$$\begin{pmatrix} P \\ Q \end{pmatrix} = U \begin{pmatrix} p \\ q \end{pmatrix}$$

において

$$dP dQ = dp dq$$

が満たされる時、この変換をシンプレクティック変換と呼ぶ

$$dP dQ = \begin{vmatrix} \partial_p P & \partial_q P \\ \partial_p Q & \partial_q Q \end{vmatrix} dp dq \quad \text{であるから}$$

シンプレクティック変換とは、変換のヤコビアンが1であること

※ 時間発展演算子を行列表示したときの行列式が1

# シンプレクティック積分

## 二次の指数分解公式

$$\tilde{U}_2(h) = \underbrace{\exp(-ihL_V/2)}_{(3)} \underbrace{\exp(-ihL_K)}_{(2)} \underbrace{\exp(-ihL_V/2)}_{(1)}$$

(1) 現在の力がそのまま続いたとして  $h/2$  だけ時間を進める

$$p(t + h/2) = p(t) + \frac{f(t)}{2}$$

(2) (1)で得た速度がそのまま続いたとして  $h$  だけ時間をすすめる

$$Q = q(t) + p(t + h/2)h$$

(3) (2)の力がそのまま続いたとして  $h/2$  だけ時間を進める

$$P = p(t + h/2) + f(t + h)h$$

# シンプレクティック積分

$$\left\{ \begin{array}{l} p(t + h/2) = p(t) + \frac{f(t)}{2}h \\ Q = q(t) + p(t + h/2)h \\ P = p(t + h/2) + f(t + h)h \end{array} \right.$$

$p(t + h/2)$ を消去して整理するとVelocity Verlet公式を得る

$$\left\{ \begin{array}{l} Q = q(t) + p(t)h + \frac{f(t)h^2}{2} \\ P = p(t) + \frac{f(t + h) + f(t)}{2}h \end{array} \right.$$

Velocity Verlet法は、シンプレクティック積分

# シンプレクティック積分のまとめ

- 数値積分とは、現在時刻 $t$ の点 $(p, q)$ から、時刻 $t + h$ の点 $(P, Q)$ を得る写像である
- 写像を表す変換のヤコビアンが1であるとき、位相空間の体積が保存される。このような写像を**シンプレクティック写像**と呼ぶ
- 変換がシンプレクティック写像であるような数値積分法を**シンプレクティック積分**と呼ぶ
- シンプレクティック積分は、**Lie-Trotterの指数分解公式**から構築できる

$$dP dQ = dp dq$$

